ZUR KRÜMMUNGSENERGIE DER KERNMATERIE

Siegfried Knaak

1972

Zur Krümmungsenergie der Kernmaterie

I n a u g u r a l - D i s s e r t a t i o n

zur

Erlangung der Doktorwürde
der Fakultät für Physik der
Ludwig - Maximilians - Universität
zu München

vorgelegt von
Siegfried Knaak
aus Berlin

München
Februar 1972

DISSERTATIONSDRUCK -SCHÖN- 8 München 40, Belgradstraße 11

UNIV.
LEIDEN
BIBL.

1.Berichterstatter: Prof. Dr. G. Süßmann
2.Berichterstatter: Prof. Dr. F. Bopp

Tag der mündlichen Prüfung: 19. Juli 1972

Inhaltsverzeichnis

	Seite
0) Einleitung	3
a) Theorien zur Struktur der Kernoberfläche	3
b) Übersicht über die weiteren Kapitel	7
1) Bemerkungen zum Hartree-Fock-Verfahren	9
a) Endliche Systeme	9
b) Sehr große (unendliche) Systeme	12
2) Die Einteilchen-Dichtematrix	14
a) Allgemeine Eigenschaften	14
b) Homogene, isotrope Kernmaterie	15
c) Kernmaterie mit ebener Oberfläche	16
d) Kernmaterie mit schwach gekrümmter Oberfläche	20
3) Entwicklung der Gesamtenergie nach $A^{1/3}$ - Potenzen	25
a) Aufstellung einer Energiedichte	25
b) Die Abhängigkeit der Energiedichte von der lokalen Krümmung	27
c) Die Gesamtenergie in Abhängigkeit von Kerngestalt und Dichteverlauf	30
d) Minimalisierung der Gesamtenergie	33
4) Spezialisierung auf eine bestimmte Gestalt der Wechselwirkung	39
a) Ansatz für die Wechselwirkung	39
b) Kernmateriegrößen	40
c) Der analytisch berechenbare Anteil der Krümmungsspannung	44
d) Entwicklung der Energie- und Teilchendichte im Kerninnern nach sphärischen Besselfunktionen	47

5) Beispiel: Lokales Potential ohne Austauschterm 53

6) Die Rechnungen 61
a) Vorbemerkungen 61
b) Anpassung der Kraftkonstanten 61
c) Zum Einteilchenpotential 63
d) Numerische Verfahren 64

7) Ergebnisse und Diskussion 68

8) Zusammenfassung 75

Anhang 78
A1) Integrale über sphärische Besselfunktionen 78
A2) Wellenfunktionen im eindimensionalen Woods-Saxon-Potential 81
A3) Orthonormierungseigenschaften 85
A4) Zur Berechnung der Oberflächendicke 89
B1) Zusammenhang zwischen dem Hartree-Fock-Verfahren und der Variationsmethode für die semiinfinite Kernmaterie mit ebener Oberfläche 91
B2) Zur Unabhängigkeit der Oberflächen- und Krümmungsspannung von der speziellen Definition der Energiedichte 100

Tabellen 107

Graphische Darstellungen 124

Literaturverzeichnis 134

0) Einleitung.

a) Theorien zur Struktur der Kernoberfläche.

Die Kräfte, die die Bildung eines Atomkerns aus Z Protonen der Masse m_p und N Neutronen der Masse m_n bewirken, sind so stark, daß die Bindungsenergie E des entstandenen Kerns zu einer merklichen Verminderung seiner Gesamtmasse M gegenüber der Summe der Massen der freien Nukleonen führt. Die relativistische Gleichung

$$(0.1) \qquad M = Z m_p + N m_n + E/c^2$$

beschreibt diesen Sachverhalt. Die Analyse der Kernmassen in der Massenspektroskopie oder aus Streuexperimenten zeigt, daß die Bindungsenergie E eines Kerns mit der Massenzahl $A = N + Z$ in erster Näherung durch

$$(0.2) \qquad E = \alpha_c A + \beta_c A^{2/3} + \frac{1}{2}\zeta_c \frac{(N-Z)^2}{A} + \frac{3e^2}{5r_c}\frac{Z^2}{A^{1/3}}$$

beschrieben werden kann, wie 1935 C.F.v. Weizsäcker[1] dargelegt hat. In der hier angegebenen vereinfachten Form kommt die Gleichung allerdings erst bei H.A. Bethe und R.F. Bacher[2] vor. Sie wurde später durch Hinzunahme weiterer Terme verbessert, zum Beispiel durch einen Kopplungsterm von $A^{2/3}$ und $N-Z$ [3] oder eine Paarkraftkorrektur[4] oder eine weitere Korrektur[5] $\tilde{\gamma}_c A^{1/3}$, deren mikroskopische Begründung wir in dieser Arbeit studieren wollen. Schaleneffekte wurden von W.D. Myers und W.J. Swiatecki[6] berücksichtigt. Sie untersuchten das Verhalten der Einteilchen-Niveaudichte unter dem Einfluß von Oberflächen-Deformationen.

Der Koeffizient α_c des ersten Terms der Energieentwicklung (0.2) ist zu deuten als Bindungsenergie eines Nukleons in Kernmaterie. Diese Formulierung wird in der Theorie der Kernmaterie präzisiert, die unendlich ausgedehnte Vielteilchensysteme als Gegenstand der Untersuchung hat. Den Ausgangspunkt stellen die Ergebnisse

der Nukleon-Nukleon Streuexperimente dar. An die Streudaten angepaßte Zwei-Teilchen-Wechselwirkungen werden für verschiedene Lösungsversuche und Näherungen des Vielkörperproblems verwendet. Die Übertragung der Verfahren auf endliche Nukleonensysteme ergibt zum Beispiel deren Anregungsenergien und Übergangswahrscheinlichkeiten und ist auch für das Studium von Kernreaktionen nützlich.

Elektronenstreuexperimente an Kernen[7] zeigen, daß die Ladungsverteilung und wahrscheinlich auch die Dichteverteilung bei großen Kernen im Kerninnern eine feste, für verschiedene Kerne gleiche Mittelpunktsdichte n_c annimmt und am Kernrand innerhalb einer bestimmten Länge t_c auf null abfällt, vgl. Abbildung 2 auf Seite 126 . Dieses Verhalten der Dichte im Kerninnern und die Tatsache, daß der Hauptanteil der Bindungsenergie E in (0.2) für große Teilchenzahlen durch den A -proportionalen Term $\alpha_c A$ gegeben ist, werden erklärt durch die Sättigungseigenschaften der Kernkräfte. Beim Hinzufügen eines weiteren Nukleons zu einem A - Teilchen-Kern wird das Kernvolumen näherungsweise um einen festen Beitrag $\frac{4\pi}{3} r_c^3$ vermehrt, und die Bindungsenergie wird um den festen Wert α_c vergrößert. Die Konstante α_c gibt damit, klassisch betrachtet, die Wechselwirkungsenergie des neuen Nukleons mit seinen nächsten Nachbarn an.

Der zweite zu $A^{2/3}$ proportionale Anteil in der Energieformel (0.2) entspricht einer Oberflächenenergie, die durch eine Oberflächenspannung σ_c der Kernmaterie hervorgerufen wird. Unter der Annahme, daß das Kernvolumen V proportional zur Teilchenzahl A ist, für sphärische Kerne der Flächeninhalt F der Kernoberfläche sich also wie $A^{2/3}$ verhält, $F = 4\pi r_c^2 A^{2/3}$, folgt nämlich $\sigma_c F = \beta_c A^{2/3}$ mit $\beta_c = 4\pi r_c^2 \sigma_c$. Die mikroskopische Herleitung der Oberflächenspannung ist eine Aufgabe aus der Theorie der Kernoberfläche. Sie wurde 1951 von W.J. Swiatecki[8] im Rahmen des Modells der semiinfiniten Kernmaterie studiert. Dabei wird vom Einfluß der Schaleneffekte abgesehen. Es wird angenommen, daß die

Struktur der Oberfläche für alle größeren Kerne dieselbe ist. Die Einteilchen - Dichtematrix ist als Summe bzw. Integral über Einteilchen-Wellenfunktionen gegeben. Der Verlauf der Finteilchen - Dichte wird so gewählt, daß die Oberflächenspannung minimal wird.

Ein anderes Verfahren, das von P.J. Hill und J.A. Wheeler[9] 1953 betrachtet wurde, geht aus von den diskreten Eigenzuständen in einem endlichen Kasten mit spiegelnden Wänden. Die Zahl der Teilchen und die Gesamtenergie als Summe der Einteilchenenergien werden in Abhängigkeit vom Kastenvolumen abgeschätzt und nach Elimination des Kastenvolumens eine Entwicklung der Energie nach $A^{1/3}$ - Potenzen angegeben.

Später folgten weitere Untersuchungen, die teils mehr an das Verfahren von Swiatecki[10-25], teils mehr an das Vorgehen von Hill und Wheeler anknüpften[26-28]. Dabei wurde in einigen der Arbeiten, die ähnlich wie Swiatecki vorgehen, die Aufsummation über Einteilchen-Wellenfunktionen durch ein statistisches Thomas-Fermi-Verfahren ersetzt, bei dem die Gesamtenergie ein Funktional der Teilchendichte wird. Es wurde versucht, die Thomas-Fermi-Methode durch Hinzufügen von Korrekturen zu verbessern, zum Beispiel durch eine Weizsäcker-Korrektur[10,11], oder durch systematische Annäherung an die Einteilchen-Dichte-Matrix[12-14,22]. Das Swiatecki-Verfahren wurde auch ohne Näherung verwendet[15,16,21,23], um zum Beispiel den Einfluß von verschiedenartigen Kräften auf die Oberflächenstruktur zu untersuchen[16] oder die Güte der Thomas-Fermi-Näherung zu überprüfen[21,23]. J.C. Reynolds hat Verbesserungen im Hinblick auf eine genauere Behandlung des Vielteilchen-Problems vorgeschlagen[29]. Oberflächenschwingungen wurden von P.J. Feibelman[30] untersucht und im Zusammenhang zur klassischen Hydrodynamik betrachtet. Den Einfluß der Spinabhängigkeit der Zwei-Teilchen-Wechselwirkung auf die Kernoberfläche untersuchte W. Stocker[31].

Die Abzählmethode von Hill und Wheeler wurde auf sphärische Kern-

gestalten angewendet[26] und die Vorhersage der Theorie an endlichen sphärischen und zylindrischen Kästen[27] nachgeprüft, die spiegelnden Wände wurden durch weiche Wände ersetzt[26,28]. G. Süßmann hat gezeigt[32], daß das Verfahren der von Swiatecki gleich kommt, wenn dafür gesorgt wird, daß die Teilchendichte im Kasteninnern beim Grenzübergang großer Volumina festgehalten wird.

Mit den beiden anderen in der Energieformel (0.2) auftretenden Termen, der Symmetrieenergie und der Coulombenergie, sowie weiteren später hinzugefügten Korrekturen, etwa der Paarkraftenergie, wollen wir uns hier nicht beschäftigen. Wir werden annehmen, daß die Neutronenzahl gleich der Potonenzahl ist, $N = Z$, und die Coulombkräfte außer acht lassen.

V.M. Strutinski und A.S. Tyapin[5] fügten im Rahmen einer Thomas-Fermi-Behandlung von sehr großen Kernen zur Energieformel (0.2) einen Beitrag hinzu, der proportional zu $A^{1/3}$ ist. Er setzt sich additiv zusammen aus einem Anteil, der die Gesamtkrümmung der Kernoberfläche mißt, und einem Anteil, der von der endlichen Größe der Kompressibilität von Kernmaterie herrührt. In einer Thomas-Fermi-Rechnung von W.D. Myers[19] zur Beschreibung von gemittelten Kerneigenschaften wurde der $A^{1/3}$ – Term explizit angegeben, und zwar ergab sich $\tilde{\gamma}_c = 7.00$ MeV. A.S. Tyapin[33] schlägt $\tilde{\gamma}_c = 15.0$ MeV vor, und zwar ebenfalls in Thomas-Fermi-Näherung. Ein krümmungsproportionaler Energiebeitrag steht auch schon bei Hill und Wheeler[9]. Hierbei ist die Gesamtkrümmung durch die Summe der drei Kantenlänge des betrachteten Quantisierungs-Kastens gegeben.

Für deformierte Kerne sind in der Formel (0.2) der $A^{2/3}$ – Term und ebenso dann nach Hinzufügung auch der $A^{1/3}$ – Term mit Korrekturen zu versehen, die die jeweilige Gestaltabhängigkeit dieser Terme beschreiben. Die Energieformel kann so benutzt werden, um die potentielle Energie der Kernspaltung in Abhängigkeit von der Deformation zu berechnen und Sattelpunkte und Spaltbarrieren zu bestimmen. H.v. Groote und E. Hilf[34] haben auf diese Weise $\tilde{\gamma}_c$ an be-

kannte Spaltbarrieren angepaßt, sie erhielten $\tilde{\gamma}_c = 6 - 8$ MeV. Allerdings entspricht die von ihnen verwendete Gestaltabhängigkeit nicht dem in der vorliegenden Arbeit (Kapitel 3, Gleichung 44) gefundenen Verhalten. Eine ganz andere Berücksichtigung der Krümmung deformierter Kerne wird von H. Schultheis, R. Schultheis und G. Süßmann[35] vorgeschlagen. Sie bestimmen in jedem Punkt der Kernoberfläche die lokale Krümmung und heften diesem Oberflächenpunkt ein Gewicht an, das sich aus dem Vergleich mit der als bekannt vorausgesetzten Energie eines sphärischen Kerns dieser Krümmung ergibt. Auf diese Weise werden Schaleneffekte gleich mitberücksichtigt. An dieser Stelle ist schließlich noch zu erwähnen, daß die Frage nach der Krümmungsabhängigkeit der Oberflächenspannung auch schon früher in der klassischen Theorie der Flüssigkeiten behandelt wurde[36-39].

b) Übersicht über die weiteren Kapitel.

Im Kapitel 1 wird das Hartree-Fock-Gleichungssystem im Hinblick auf Variationsprinzipien betrachtet. Dabei kann man sich auf die Bestimmung der Einteilchen-Dichtematrix $n(x',x'')$ beschränken. Ihr Verhalten für sehr große Systeme wird diskutiert. Die Spezialisierung auf Kernmaterie mit einer ebenen oder leicht gekrümmten Oberfläche geschieht in Kapitel 2. Die Abhängigkeit der Dichtematrix von der lokalen Krümmung der Oberfläche wird untersucht. Auch die Energiedichte hängt dann von der lokalen Krümmung ab, wie in Kapitel 3 dargelegt wird. Die Gesamtenergie E ist als räumliches Integral über die Energiedichte gegeben. Es wird die Abhängigkeit der Energie von den geometrischen Gegebenheiten, der Größe von Oberfläche F und integraler Krümmung L, studiert. Die Gesamtenergie hängt außerdem von der Teilchendichte n_0 im Kerninnern und dem Verhalten der Dichtematrix am Kernrand ab. Die Minimalisierung der Energie bezüglich dieser Größen ergibt die Entwicklung der Energie nach $A^{1/3}$-Potenzen.

Im folgenden Kapitel 4 beginnt die Spezialisierung auf eine bestimmte Gestalt der effektiven Wechselwirkung. Alle analytisch berechenbaren Größen werden angegeben. Es wird ein Verfahren entwikkelt, um die im Kerninnern nur langsam konvergierenden Integrale numerisch auswerten zu können. Man bekommt Entwicklungen der Dichten bezüglich ihrer Ortsabhängigkeit nach sphärischen Besselfunktionen. Die Koeffizienten der Entwicklungen sind allein durch eine Art Streuphase ϑ gegeben.

Im folgenden Kapitel 5 wird eine im Lehrbuch von Preston[40] stehende Abschätzung für die Gesamtenergie mit dem in den vorhergehenden Kapiteln entwickelten Formalismus hergeleitet. Eine leichte Verallgemeinerung erweist sich für die spätere Diskussion der Ergebnisse als nützlich.

Die Anpassung der noch offenen Kraftkonstanten in der effektiven Wechselwirkung wird in Kapitel 6 beschrieben. Dort werden auch die numerischen Verfahren behandelt. Die Ergebnisse der Rechnungen werden im Kapitel 7 diskutiert. In Kapitel 8 schließlich werden die behandelten Fragen nochmals zusammenfassend dargestellt.

1) Bemerkungen zum Hartree-Fock-Verfahren.

a) Endliche Systeme.

In den folgenden Überlegungen wird angenommen, daß eine effektive Zweiteilchen-Wechselwirkung $\langle x_1 x_2 \mid u \mid x_1' x_2' \rangle$ so definiert werden kann, daß mit ihr im Hartree-Fock-Verfahren die Kerneigenschaften richtig wiedergegeben werden können[41,42]. Dabei ist die Näherung weniger im Hartree-Fock-Verfahren als vielmehr in der Aufstellung dieser effektiven Wechselwirkung zu suchen.

Das Hartree-Fock-Gleichungssystem erhält man, wenn man einen Satz von A orthonormalen Wellenfunktionen $\varphi_\nu(x)$, $\nu = 1, \ldots, A$ sucht, die einen Funktional-Ausdruck der Gestalt

$$
\begin{aligned}
E^A(\varphi_\nu) = {} & \int dx \sum_\nu \varphi_\nu^*(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right) \frac{\partial^2}{\partial \vec{r}^2} \varphi_\nu(x)\, \theta(\mu - \varepsilon_\nu) \\
& + \frac{1}{2} \int dx_1\, dx_2\, dx_1'\, dx_2' \Big\{ \sum_\nu \varphi_\nu(x_1)\, \varphi_\nu^*(x_1')\, \theta(\mu - \varepsilon_\nu) \cdot \\
& \left[\langle x_1 x_2 \mid u \mid x_1' x_2' \rangle - \langle x_1 x_2 \mid u \mid x_2' x_1' \rangle \right] \cdot \\
& \sum_{\nu'} \varphi_{\nu'}(x_2)\, \varphi_{\nu'}^*(x_2')\, \theta(\mu - \varepsilon_{\nu'}) \Big\}
\end{aligned}
\tag{1.1}
$$

bezüglich Variation der $\varphi_\nu(x)$ unter Einhaltung der Bedingung, daß die $\varphi_\nu(x)$ orthonormal sind, stationär machen. Hier steht die Größe x für den Ortsvektor $\vec{r}$ und die Spin-und Isospin-Variablen σ, τ. Das Integral $\int dx$ ist also eine Integration $\int d\vec{r}^{\,3}$ im Ortsraum und eine Summe $\sum_{\sigma,\tau}$ über Spin und Isospin. Die ε_ν bedeuten Einteilchenenergien, von denen A Werte unterhalb der Fermikante μ liegen. Sie sind mit den unten in Gleichung (1.2) erscheinenden Eigenwerten zu identifizieren. Diese in (1.1) gewählte Schreibweise läßt sich später leicht für unendlich große Systeme verallgemeinern.

Die Orthonormalitätseigenschaften der $\varphi_\nu(x)$ werden durch die Methode der Lagrange-Parameter berücksichtigt. Erfüllen die orthonormierten Funktionen $\varphi_\nu(x)$ das Gleichungssystem

$$(1.2a) \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi_\nu(x) + \int dx' \langle x|V|x'\rangle \varphi_\nu(x') = \varepsilon_\nu \varphi_\nu(x) \quad ,$$

$$(1.2b) \quad \langle x_1|V|x_1'\rangle = \int dx_2\, dx_2' \left[\langle x_1 x_2|U|x_1' x_2'\rangle - \langle x_1 x_2|U|x_2' x_1'\rangle\right] \cdot \sum_\nu \varphi_\nu(x_2')\, \varphi_\nu^*(x_2)\, \theta(\mu - \varepsilon_\nu) \quad ,$$

so ist E^A aus (1.1) stationär. Denn die Variation von E^A in (1.1) ergibt unter Berücksichtigung von (1.2a) einfach

$$(1.3) \quad \delta E^A = \sum_\nu \theta(\mu - \varepsilon_\nu)\, \varepsilon_\nu\, \delta \int dx\, \varphi_\nu^*(x) \varphi_\nu(x) \quad ,$$

und die rechte Seite verschwindet, da nur Variationen zugelassen sind, die die Orthonormalitätseigenschaft des Funktionensystems $\varphi_\nu(x)$ erhalten. Nach Gleichung (1.3) ist E^A sogar bezüglich Variationen der $\varphi_\nu(x)$ stationär, die nur die Normierung der Funktionen $\varphi_\nu(x)$ erhalten. Verlangt man aber umgekehrt nur die Normierung der $\varphi_\nu(x)$, so ist es natürlich denkbar, daß man einen Satz von $\varphi_\nu(x)$ erhält, die das Gleichungssystem (1.2) erfüllen, aber untereinander nicht orthogonal sind. Beispielsweise könnten alle $\varphi_\nu(x)$ für $\nu = 1, \ldots, A$ und alle ε_ν einander gleich sein, und dies könnte für E^A einen viel tieferen Wert ergeben als den kleinsten Hartree-Fock-Wert. Eine Hartree-Fock-Lösung wird man aber trotzdem dann erhalten, wenn man dafür sorgt, daß das System der zur Variation zugelassenen Funktionen $\varphi_\nu(x)$ (Vergleichsfunktionen) schon sehr ähnlich den zu erwartenden Lösungen von (1.2) ist.

Die Gleichung (1.1) zeigt, daß E^A stets nur abhängt von der Einteilchendichtematrix

$$(1.4) \quad n(x', x'') = \sum_\nu \theta(\mu - \varepsilon_\nu)\, \varphi_\nu^*(x'')\, \varphi_\nu(x') \quad .$$

Aus der Orthonormalität der $\varphi_\nu(x)$ folgt die Beziehung

(1.5) $$\int dx\, n(x',x)\, n(x,x'') = n(x',x'')$$

für die Dichtematrix, außerdem muß auch

(1.6) $$\int dx\, n(x,x) = A$$

gelten. Ist nun umgekehrt $n(x',x'')$ eine Funktion mit

(1.7) $$n(x',x'')^* = n(x'',x') \quad ,$$

die (1.5) und (1.6) erfüllt, so wird es einen orthonormalen Satz von Funktionen $\varphi_\nu(x)$ geben, nach denen $n(x',x'')$ in der Gestalt

(1.8) $$n(x',x'') = \sum_\nu n_\nu\, \varphi_\nu^*(x'')\, \varphi_\nu(x')$$

mit Koeffizienten n_ν entwickelt werden kann, die den Bedingungen

(1.9) $$n_\nu(n_\nu - 1) = 0 \quad ,$$

(1.10) $$\sum_\nu n_\nu = A$$

genügen. Das bedeutet, daß genau A Koeffizienten gleich 1 sind und alle andern verschwinden. Daß die Koeffizienten n_ν auch noch die Gestalt wie in Gleichung (1.4) haben, ist eine Zusatzforderung, die für ein unendlich ausgedehntes System im Grundzustand richtig sein wird[43], dagegen für endliche Systeme wohl nur eine Näherung darstellt.

Die vorstehenden Überlegungen zeigen, daß der (1.1) entsprechende Ausdruck

(1.11) $$E^A(n) = \int dx \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right) \frac{\partial^2}{\partial r_{12}}\, n(x',x'')\Big|_{x''=x'=x} +$$

$$+ \frac{1}{2} \int dx_1' dx_1'' dx_2' dx_2'' \; n(x_1'', x_1') \left[\langle x_1' x_2' | U | x_1'' x_2'' \rangle \right.$$

$$\left. - \langle x_1' x_2' | U | x_2'' x_1'' \rangle \right] n(x_2'', x_2')$$

bezüglich Variation der Funktion $n(x', x'')$ unter Einhaltung der Bedingungen (1.5)-(1.7) stationär ist. Eine Lösung $n(x', x'')$ dieser Aufgabe ist durch den Ausdruck (1.4) gegeben mit dem speziellen Funktionensatz $\varphi_\nu(x)$, der dem System (1.2) genügt. Bei der Variation von $n(x', x'')$ kann sogar die Bedingung (1.5) teilweise verletzt werden, wie sich aus den Überlegungen im Anschluß an Gleichung (1.3) ergibt.

b) Sehr große (unendliche) Systeme.

Sie sind dadurch definiert, daß die durch (1.6) gegebene Teilchenzahl A sehr groß ist. Da die $\varphi_\nu(x)$ in der Entwicklung (1.4) auf 1 normiert sind, muß daher die Summation über sehr viele Indices ν erfolgen. Gleichzeitig wird das Normierungsvolumen der $\varphi_\nu(x)$ sehr groß, eine Folge der Sättigungseigenschaften der Kernkräfte, so daß die $\varphi_\nu(x)$ selbst dem Betrag nach im Durchschnitt sehr klein werden. Es ist daher zu erwarten, daß man eine brauchbare Näherung für die Dichtematrix erhält, wenn man die Summation in (1.4) über orthonormierte Funktionen $\varphi_\nu(x)$ durch einen Integralausdruck

$$(1.12) \qquad n(x', x'') = \sum_s \int d\lambda \; \Theta(\mu - \varepsilon_{\lambda s}) \; \psi_{\lambda s}(x') \; \psi_{\lambda s}^*(x'')$$

ersetzt, wobei die noch verbleibende Summe die Spin und Isospin Eigenschaften von $n(x', x'')$ beschreibt. Die Beziehung (1.5) wird erfüllt, wenn die $\psi_{\lambda s}(x)$ der Forderung

$$(1.13) \qquad \int dx \; \psi_{\lambda s}(x) \; \psi_{\lambda' s'}^*(x) = \delta_{ss'} \, \delta(\lambda - \lambda')$$

genügen. (Wie zuvor ist $\int dx = \sum_{\sigma,\tau} \int d\vec{r}^{\,3}$ gemeint.) Die Integrationsvariable λ in (1.12) wird im allgemeinen dreidimensional sein, wenn die Funktion $\psi_{\lambda s}(x)$ in allen drei Dimensionen von $\vec{r}$ nicht auf einen endlichen Bereich beschränkt ist. Sind

jedoch einige der Funktionen $\chi_{\lambda s}(x)$ in zwei Dimensionen unendlich ausgedehnt und in einer dazu senkrechten Richtung nur in einem beschränkten Intervall merklich von null verschieden, so steht λ für eine zweidimensionale Integrationsvariable und einen diskreten Summationsindex. Diese letztere Möglichkeit ist zum Beispiel für Wellenfunktionen gegeben, die infolge ihres hohen Drehimpulses hauptsächlich auf die Kernoberfläche konzentriert sind[31].

Die Beziehung (1.6) kann natürlich durch den Ansatz (1.12) nicht erfüllt werden, wenn die Wellenfunktionen $\chi_{\lambda s}(x)$ nicht auf einen endlichen Ortsbereich beschränkt sind. Stattdessen kann nur verbal gesagt werden, daß für die Dichtematrix eines sehr großen Nukleonensystems im Innern oder an der Oberfläche ein Ausdruck der Gestalt (1.12) eine brauchbare Näherung sein wird. Der Ansatz kann für die verschiedenen Kernregionen durchaus verschieden sein. Schließlich wird (1.6) in Kapitel 3 durch eine Aussage über die Lage der Kernoberfläche bei vorgegebenem Dichteverlauf ersetzt werden.

2) Die Einteilchen - Dichtematrix.

a) Allgemeine Eigenschaften.

Zunächst wird eine Annahme über die Spin-und Isospinabhängigkeit gemacht. Die Dichtematrix soll sich in der Gestalt

$$(2.1) \qquad n(x',x'') = \tfrac{1}{4}\,\delta_{\sigma'\sigma''}\,\delta_{\tau'\tau''}\,n(\vec{r}',\vec{r}'')$$

schreiben lassen. Bezüglich des Spins ist das zum Beispiel erfüllt, wenn jede Einteilchenwellenfunktion $\varphi_\nu(x)$, $\nu = 1,\dots,A$ Eigenfunktion zur z-Komponente s_z ist und es zu jeder Wellenfunktion mit $s_z = +\frac{1}{2}$ eine Wellenfunktion mit $s_z = -\frac{1}{2}$ mit derselben Funktion im Ortsraum $\vec{r}$ gibt. Allgemeiner kann man sagen, daß (2.1) bezüglich des Spins erfüllt ist, wenn $n(x',x'')$ bei jeder Drehung im Spinraum in sich übergeht. Entsprechende Bemerkungen gelten für die Isospinvariable. Wir nehmen an, daß das jeweils betrachtete Nukleonensystem gleich viele Protonen wie Neutronen hat. Um Systeme im Grundzustand mit sehr vielen Nukleonen untersuchen zu können, müssen wir die Coulomb-Kräfte abgeschaltet denken, damit keine spontane Kernspaltung auftritt.

Der Faktor $\frac{1}{4}$ in Gleichung (2.1) ist so gewählt, daß $n(\vec{r},\vec{r})$ die räumliche Nukleonendichte ist. Die Gleichungen (1.5) und (1.6) erfordern

$$(2.2) \qquad \int d\vec{r}^{\,3}\, n(\vec{r}',\vec{r})\, n(\vec{r},\vec{r}'') = 4\, n(\vec{r}',\vec{r}'') \quad ,$$

$$(2.3) \qquad \int d\vec{r}^{\,3}\, n(\vec{r},\vec{r}) = A \quad .$$

Die letzte Gleichung besagt, daß die räumliche Integration über die Teilchendichte einfach die Zahl der Nukleonen ergibt.

Im folgenden werden für verschiedene Zonen eines sehr großen Kerns Ansätze für die Dichtematrix gemacht. Das Ziel ist, mit diesen Ansätzen, die noch einige freie Parameter enthalten, die Gesamtenergie des Kernes, etwa nach Gleichung (1.11) im vorigen

Kapitel, zu minimalisieren. Wir unterscheiden den sehr großen Bereich des Kerninnern, für den die homogene, isotrope Kernmaterie eine gute Näherung sein sollte, von der Oberflächenzone, die wir uns als schwach gekrümmt vorstellen.

b) Homogene, isotrope Kernmaterie.

Die Homogenität bedeutet für die Dichtematrix, daß $n(\vec{r}', \vec{r}'')$ nur von der Differenz $\vec{s} = \vec{r}' - \vec{r}''$ der Vektoren $\vec{r}'$ und $\vec{r}''$ abhängt. Ist die Dichtematrix außerdem von der Richtung dieses Relativvektors unabhängig (Isotropie), so darf sie nur noch von seinem Betrag $|\vec{s}|$ abhängen. Die durch

$$(2.4) \qquad n(\vec{r}', \vec{r}'') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{k}^3 \, n(\vec{k}) \, e^{i \vec{k} \vec{s}} \quad , \quad \vec{s} = \vec{r}' - \vec{r}'' ,$$

definierte Fouriertransformierte $n(\vec{k})$ hängt dann ebenfalls nur vom Betrag $|\vec{k}|$ des Vektors $\vec{k}$ ab. Die Bedingung (2.2) ergibt hier

$$(2.5) \qquad n(\vec{k})^2 = 4 \, n(\vec{k}) \quad .$$

Daher ist $n(\vec{k})$ entweder null oder gleich 4. Dies ist so zu verstehen, daß jeder durch den Vektor $\vec{k}$ repräsentierte Ortszustand entweder von vier Nukleonen besetzt (jeweils zwei Spin-bzw. Isospin-Einstellungen) oder gar nicht besetzt ist.

Entsprechend der Gleichung (1.4) aus dem vorhergehenden Kapitel wollen wir annehmen, daß $n(\vec{k})$ als θ-Funktion

$$(2.6) \qquad n(\vec{k}) = 4 \, \theta(k_0^2 - \vec{k}^2)$$

mit einem Fermiimpuls $p_0 = \hbar k_0$ geschrieben werden kann. Nach Gleichung (2.4) stehen Teilchendichte und Fermiimpuls im Zusammenhang

$$(2.7) \qquad n(\vec{r}, \vec{r}) = \frac{2}{3\pi^2} k_0^3 = n_0 \quad .$$

Der Ansatz (2.4), (2.6) für die Dichtematrix enthält somit noch die Mittelpunktsdichte n_0 bzw. den Fermiimpuls $\hbar k_0$ als freien Parameter.

c) Kernmaterie mit ebener Oberfläche.

Um zu einer Näherung für die Dichtematrix in der Oberflächenzone zu gelangen, denken wir uns ein kartesisches Koordinatensystem eingeführt, dessen z-Achse senkrecht zur Oberfläche in Richtung vom Kerninnern zum Vakuum weist, und dessen $x-y$-Ebene parallel zur (ebenen) Oberfläche liegt. Die genaue Definition der Kernoberfläche, auch für den Fall mit Krümmung, werden wir uns erst im Kapitel 3 überlegen. Ihre räumliche Lage ist für unsere Betrachtungen im Moment belanglos. Wir führen die Notation

$$\vec{a} = a_x \vec{e}_x + a_y \vec{e}_y + a_z \vec{e}_z = \vec{a}_\perp + a_z \vec{e}_z$$

ein. Mit $\vec{a}_\perp$ ist also die Projektion von $\vec{a}$ auf die $x-y$-Ebene $\vec{a}_\perp = \vec{a} - (\vec{a}\cdot\vec{e}_z)\,\vec{e}_z$ gemeint. Der Ansatz

$$(2.8) \qquad n(\vec{r}', \vec{r}'') = \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\vec{k}_\perp^{\,2}\; n(|\vec{k}_\perp|, z', z'')\, e^{i \vec{k}_\perp \vec{\xi}_\perp}$$

mit $\vec{\xi}_\perp = \vec{r}_\perp' - \vec{r}_\perp''$ erfüllt die Bedingungen, daß $n(\vec{r}', \vec{r}'')$ in sich übergeht, wenn die Orte $\vec{r}'$ und $\vec{r}''$ gleichzeitig parallel zur Oberfläche verschoben werden (Unabhängigkeit von $\vec{r}_\perp = \frac{1}{2}(\vec{r}_\perp' + \vec{r}_\perp'')$) und $\vec{r}'$ und $\vec{r}''$ um eine Achse senkrecht zur Oberfläche gedreht werden (der Ausdruck hängt nur von $|\vec{\xi}_\perp|$ ab).

Die teilweise transformierte Größe $n(|\vec{k}_\perp|, z', z'')$ wird ebenfalls als Integral dargestellt, und zwar diagonal in gewissen Funktionen $\gamma(|\vec{k}_\perp|, k_z, z)$, die wir uns später als Lösung einer eindimensionalen Einteilchengleichung vorstellen,

$$(2.9) \qquad n(|\vec{k}_\perp|, z', z'') = \int dk_z \, n(|\vec{k}_\perp|, k_z) \, \psi(|\vec{k}_\perp|, k_z, z') \, \psi^*(|\vec{k}_\perp|, k_z, z'') \, .$$

Wir verlangen von diesen Funktionen $\psi(|\vec{k}_\perp|, k_z, z)$, daß sie für $z \to +\infty$ (Vakuum) verschwinden. Im Kerninnern, d.h. für $z \to -\infty$, soll

$$(2.10) \qquad \psi(|\vec{k}_\perp|, k_z, z) = \sin(-k_z z + \vartheta(|\vec{k}_\perp|, k_z)), \quad -z \gg |t_0|$$

gelten, wobei $|t_0|$ ein Maß für die Breite der Oberflächenzone ist. Diese Bedingung bewirkt, daß die Dichtematrix im Kerninnern die Gestalt

$$(2.11) \qquad n(|\vec{k}_\perp|, z', z'') = \int dk_z \, n(|\vec{k}_\perp|, k_z) \, \tfrac{1}{2} \cos(-k_z \zeta) - \int dk_z \, n(|\vec{k}_\perp|, k_z) \, \tfrac{1}{2} \cos(-2k_z z + 2\vartheta(|\vec{k}_\perp|, k_z))$$

mit der Relativkoordinate $\zeta = z' - z''$ und der Schwerpunktskoordinate $z = \frac{1}{2}(z' + z'')$ annimmt. Für $z \to -\infty$ verschwindet der zweite Summand auf der rechten Seite von (2.11). Um im Kerninnern Übereinstimmung mit dem Ansatz (2.4), (2.6) zu erreichen, müssen wir

$$(2.12) \qquad n(|\vec{k}_\perp|, k_z) = \frac{4}{\pi} \, \theta(k_0^2 - \vec{k}_\perp^{\,2} - k_z^2)$$

setzen.

Zum Ausdruck in (2.9) kann man sich noch eine Summe über diskrete Wellenfunktionen $\psi_\nu(|\vec{k}_\perp|, z') \, \psi_\nu^*(|\vec{k}_\perp|, z'')$ hinzugefügt denken, die für $z \to +\infty$ und für $z \to -\infty$ verschwinden.[31] Als allgemeinen Ausdruck für die Dichtematrix finden wir daher

$$(2.13) \qquad n(\vec{r}', \vec{r}'') = \frac{1}{(2\pi)^3} \cdot 8 \int d\vec{k}^{\,3} \, \theta(k_0^2 - \vec{k}_\perp^{\,2} - k_z^2) \cdot$$

$$\cdot\, e^{i\vec{k}_\perp \vec{\xi}_\perp}\, \psi(|\vec{k}_\perp|, k_z, z')\, \psi^*(|\vec{k}_\perp|, k_z, z'')$$

$$+ \left(\frac{1}{2\pi}\right)^2 \int d\vec{k}_\perp^{\,2}\, e^{i\vec{k}_\perp \vec{\xi}_\perp} \sum_\nu n_\nu(|\vec{k}_\perp|)\, \psi_\nu(|\vec{k}_\perp|, z')\, \psi_\nu^*(|\vec{k}_\perp|, z'') \quad .$$

Dieser Ansatz befriedigt die Gleichung (2.2), wenn noch folgende Gleichungen gelten:

$$\psi(|\vec{k}_\perp|, k_z, z) = -\psi(|\vec{k}_\perp|, -k_z, z) \quad , \tag{2.14}$$

$$\begin{cases} \text{a)} & \int dz\, \psi^*(|\vec{k}_\perp|, k_z', z)\, \psi(|\vec{k}_\perp|, k_z'', z) = \frac{\pi}{2}\left[\delta(k_z' - k_z'') - \delta(k_z' + k_z'')\right], \\ \text{b)} & \int dz\, \psi^*(|\vec{k}_\perp|, k_z, z)\, \psi_\nu(|\vec{k}_\perp|, z) = 0 \quad , \\ \text{c)} & \int dz\, \psi_{\nu'}^*(|\vec{k}_\perp|, z)\, \psi_{\nu''}(|\vec{k}_\perp|, z) = \delta_{\nu',\nu''} \quad , \end{cases} \tag{2.15}$$

$$n_\nu(|\vec{k}_\perp|) \cdot \left[n_\nu(|\vec{k}_\perp|) - 4\right] = 0 \quad . \tag{2.16}$$

Die Gleichungen (2.15) stellen Orthonormalisierungs-Relationen dar. Die Gleichung (2.16) entspricht der Gleichung (1.9).

Wir werden später Funktionen ψ wählen, die die Gleichungen (2.14)-(2.16) automatisch dadurch erfüllen, daß sie Lösungen einer Differentialgleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2}\psi(z) + \frac{\hbar^2}{2m}|\vec{k}_\perp|^2\psi(z) + \int dz'\, \mathcal{U}(|\vec{k}_\perp|, z, z')\, \psi(z') = \varepsilon\, \psi(z) \tag{2.17}$$

sind. Das Einteilchenpotential $\mathcal{U}$ ist als hermitesch und reell gedacht und ist im Kerninnern durch

$$\mathcal{U}(|\vec{k}_\perp|, z, z') = \int dk_z\, \mathcal{U}\left(\sqrt{|\vec{k}_\perp|^2 + k_z^2}\right) e^{i k_z (z - z')} \tag{2.18}$$

gegeben. Da die Wellenfunktionen mit kontinuierlichem Index im Kerninnern sich wie ein Sinus verhalten (2.10), ist für sie in

Gleichung (2.17)

$$\varepsilon = \varepsilon(k) = \frac{\hbar^2}{2m}\vec{k}^2 + u(|\vec{k}|) \tag{2.19}$$

zu wählen. Für $|\vec{k}| = k_0$ erhält man die Fermienergie

$$\varepsilon_0 = \frac{\hbar^2}{2m}k_0^2 + u(k_0) \tag{2.20}$$

Die Funktion $u(k)$ wird als monoton wachsend angenommen werden. Die Funktion $\theta(k_0^2 - \vec{k}^2)$ in (2.6) und (2.13) könnte daher durch $\theta(\varepsilon_0 - \varepsilon(k))$ ersetzt werden. Für die Wellenfunktionen mit diskretem Index ν ist

$$\varepsilon = \varepsilon_\nu(|\vec{k}_\perp|) \tag{2.21}$$

so zu bestimmen, daß die Gleichung (2.17) normierbare Lösungen besitzt. Die Gleichung (2.16) erfüllen wir, wenn wir wie in Gleichung (1.4) im vorigen Kapitel

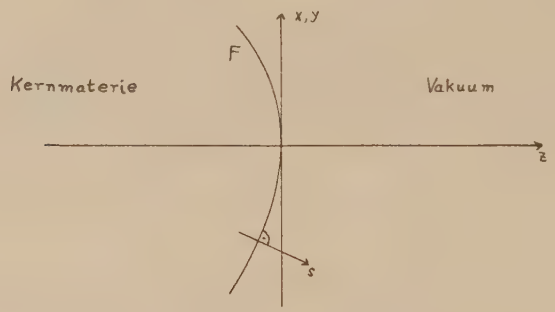
$$n_\nu(|\vec{k}_\perp|) = 4\,\theta(\varepsilon_0 - \varepsilon_\nu(|\vec{k}_\perp|)) \tag{2.22}$$

ansetzen. Hierdurch wird die $\int d\vec{k}_\perp^{\,2}$ – Integration in (2.13) begrenzt.

Die Beziehung (2.14) ergibt sich aus der Überlegung, daß die Differentialgleichung (2.17) für gegebenes ε höchstens eine Lösung hat, die für $z \to +\infty$ verschwindet. Nach (2.19) gehört aber zu k_z und $-k_z$ der gleiche Parameter ε. Offenbar muß deshalb die in (2.10) definierte und stetig vorausgesetzte Phase $\vartheta(|\vec{k}_\perp|, k_z)$ eine ungerade Funktion von k_z sein. Die Orthogonalitätsrelationen in (2.15) werden im Anhang A3 hergeleitet.

d) Kernmaterie mit schwach gekrümmter Oberfläche.

Wir denken uns ähnlich wie im vorigen Abschnitt ein kartesisches Koordinatensystem in einer gerade herausgegriffenen Oberflächenzone so gelegt, daß die $x-y-$ Ebene Tangentialebene der Oberfläche wird. Die z -Achse soll wieder vom Kerninnern ins Vakuum weisen.



Skizze 1

In diesem Koordinatensystem ist dann nach geeigneter Drehung des $x-y-$ Achsenkreuzes die Oberfläche F näherungsweise durch die Gleichung

$$(2.23) \qquad F: \quad z + \frac{x^2}{2R_x} + \frac{y^2}{2R_y} = 0$$

mit den Hauptkrümmungsradien R_x und R_y gegeben. Die Summe $\varkappa = \frac{1}{R_x} + \frac{1}{R_y}$ bezeichnet die Hauptkrümmung der durch (2.23) gegebenen Fläche im Unterschied etwa zur Gaußschen Krümmung $\frac{1}{R_x} \cdot \frac{1}{R_y}$. Im nächsten Kapitel 3 werden wir sehen, daß es in der betrachteten Näherung nur auf $\varkappa$ ankommt.

Da wir weiter unten bei der Berechnung der Gesamtenergie

höchstens in $\frac{a}{R_x}$ und $\frac{a}{R_y}$ lineare Terme zu berücksichtigen haben, wobei a ein Maß für die Reichweite der Kernkräfte ist, wollen wir in diesen Größen quadratische Glieder hier stets weglassen.

Wählen wir nun einen Punkt $P = (x, y, z)$ in der Nähe der Fläche F und nahe der z-Achse und fragen nach seinem Abstand s von der Fläche. Dann haben wir das Minimum von

$$(2.24) \qquad s^2 = (x_F - x)^2 + (y_F - y)^2 + \left(-\frac{x_F^2}{2R_x} - \frac{y_F^2}{2R_y} - z\right)^2$$

zu bestimmen bezüglich Variation der Koordinaten $x_F, y_F \left(, z_F = -\frac{x_F^2}{2R_x} - \frac{y_F^2}{2R_y}\right)$ eines Fußpunktes $P_F = (x_F, y_F, z_F)$ auf der Fläche. Das ergibt die Bedingungen

$$(2.25) \qquad \begin{aligned} 2(x_F - x) + 2\left(-\frac{x_F^2}{2R_x} - \frac{y_F^2}{2R_y} - z\right)\cdot\left(-\frac{x_F}{R_x}\right) &= 0 \ , \\ 2(y_F - y) + 2\left(-\frac{x_F^2}{2R_x} - \frac{y_F^2}{2R_y} - z\right)\cdot\left(-\frac{y_F}{R_y}\right) &= 0 \ , \end{aligned}$$

welche zeigen, daß $x_F = x + \ldots$ und $y_F = y + \ldots$ ist bis auf Korrekturen der Größenordnung $\frac{a}{R_x}$ und $\frac{a}{R_y}$. Denkt man sich diese x_F und y_F in (2.24) eingesetzt, so erkennt man, daß die Größe

$$(2.26) \qquad s = z + \frac{x^2}{2R_x} + \frac{y^2}{2R_y} + \ldots$$

bis auf quadratische Korrekturen $\left(\frac{a}{R_x}\right)^2$, $\left(\frac{a}{R_y}\right)^2$ und $\left(\frac{a}{R_x}\right)\cdot\left(\frac{a}{R_y}\right)$ den (mit einem Vorzeichen versehenen) Abstand von der Fläche (2.23) mißt. Alle Punkte auf der Fläche $s = \text{const}$ haben denselben Abstand zur Fläche $s = 0$. Damit haben wir die durch (2.23) gegebene Fläche F in eine Schar von Steinerschen Flächen eingebettet.

Für sphärische Krümmung ist $R_x = R_y = R_0$. Betrachten wir hier zunächst den auf $\vec{e}_z$ senkrecht stehenden Vektor $\vec{q}_\perp$

$$\vec{q}_\perp = \vec{\xi}_\perp - \frac{1}{R_0}\vec{r}_1\zeta \quad ,$$

$$\vec{\xi} = \vec{r}' - \vec{r}'' \,, \quad \vec{r} = \tfrac{1}{2}(\vec{r}' + \vec{r}'') \,, \quad \zeta = z' - z'' \,, \tag{2.27}$$

wobei $\vec{r}'$, $\vec{r}''$ die Vektoren sind, für die $n(\vec{r}', \vec{r}'')$ zu bilden ist. Man kann leicht ausrechnen, daß unter Vernachlässigung quadratischer Ausdrücke in $\frac{a}{R_0}$ die Beziehung

$$\vec{q}_\perp^{\,2} = \left| \vec{\xi} - \frac{(\vec{r} + \vec{R}_0)\,[(\vec{r} + \vec{R}_0)\cdot\vec{\xi}\,]}{|\vec{r} + \vec{R}_0|^2} \right|^2 + \dots \quad ,$$

$$\vec{R}_0 = \vec{e}_z R_0 \tag{2.28}$$

richtig ist. Da der Krümmungsmittelpunkt M bei $-\vec{R}_0$ liegt, bleiben Skalarprodukte aus Vektoren, die die Gestalt $\vec{w} = \vec{r} + \vec{R}_0$ haben, bei Drehungen um den Krümmungsmittelpunkt invariant*). Also ändert sich auch $\vec{q}_\perp^{\,2}$ nicht, wenn $\vec{r}'$ und $\vec{r}''$ gleichzeitig einer Drehung um M unterworfen werden. Schließlich kann man noch nachrechnen, daß außerdem die Beziehung

$$(s' - s'')^2 + \vec{q}_\perp^{\,2} = (\vec{r}' - \vec{r}'')^2 + \dots \tag{2.29}$$

bei entsprechenden Vernachlässigungen richtig ist.

Setzen wir jetzt einfach in Analogie zu (2.13) als Dichtematrix

$$n(\vec{r}', \vec{r}'') = \frac{2}{(2\pi)^3}\int d\vec{k}^{\,3}\,\theta(k_0^2 - \vec{k}^{\,2})\, e^{i\vec{k}_\perp\vec{q}_\perp}\,\psi(|\vec{k}_\perp|, k_z, s') \cdot$$

$$\cdot\,\psi^*(|\vec{k}_\perp|, k_z, s'') + \frac{4}{(2\pi)^2}\int d\vec{k}_\perp^{\,2}\, e^{i\vec{k}_\perp\vec{q}_\perp}\sum_\nu \theta(\varepsilon_0 - \varepsilon_\nu(|\vec{k}_\perp|)) \cdot \tag{2.30}$$

$$\cdot\,\psi_\nu(|\vec{k}_\perp|, s')\;\psi_\nu^*(|\vec{k}_\perp|, s'')$$

an, so hat diese die folgenden Eigenschaften. Da sie nur von den

---

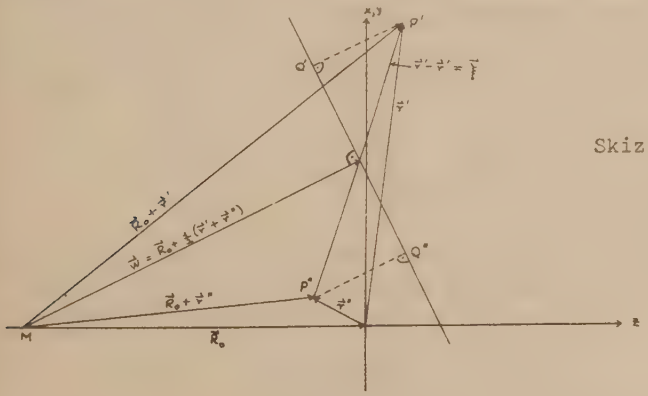
*) Für Linearkombinationen solcher Vektoren (z.Bsp. $\vec{\xi}$) gilt dies dann ebenfalls.

Größen $|\vec{q}_\perp|$, s' und s'' abhängt, ändert sie sich nicht, wenn $\vec{r}'$ und $\vec{r}''$ gleichzeitig um M gedreht werden. Im Kerninnern, d.h. für $\frac{1}{2}(s'+s'') \to -\infty$, hängt $n(\vec{r}', \vec{r}'')$ nur noch von $(s'-s'')^2 + \vec{q}_\perp^{\,2}$ ab, wenn die ψ Funktionen wieder die Eigenschaft (2.10) haben, und zwar geht wegen des Bestehens der Beziehung (2.29) die Dichtematrix in den Ausdruck (2.4) für die Kernmaterie über. Diese Eigenschaft bleibt erhalten, wenn wir in Verallgemeinerung für nichtsphärische Krümmung anstelle des $\vec{q}_\perp$ aus Formel (2.27) den Vektor

$$(2.31) \qquad \vec{q}_\perp = \vec{\xi}_\perp - \left(\frac{x}{R_x}\,\vec{e}_x + \frac{y}{R_y}\,\vec{e}_y \right) \zeta$$

in (2.30) einsetzen, denn die Beziehung (2.29) ist nach wie vor richtig.

Die Gleichung (2.28) zeigt, daß bei sphärischer Krümmung (Mittelpunkt M bei $-\vec{R}_0$) der Vektor $\vec{q}_\perp$ gerade näherungsweise für die Komponente ($\overrightarrow{Q'Q''}$ in der Skizze unten) von $\vec{\xi} = \vec{r}' - \vec{r}''$ steht, die senkrecht zum Vektor $\vec{w} = \vec{R}_0 + \vec{r}$ ist. ($\vec{w}$ weist vom Krümmungsmittelpunkt M zum Schwerpunkt $\vec{r}$ der Vektoren $\vec{r}'$ und $\vec{r}''$.) Daher bestimmt $|\vec{q}_\perp|$ bei festem s' und s'' den Öffnungswinkel zwischen dem Vektor $\vec{r}' + \vec{R}_0$ von M nach P' und dem Vektor $\vec{r}'' + \vec{R}_0$ von M nach P'' , vgl. folgende Skizze:



Skizze 2

Fordert man Invarianz der Dichtematrix gegenüber gleichzeitiger Drehung von $\vec{r}'$ und $\vec{r}''$ um $-\vec{R}_0$, so darf sie bei vorgegebenen s' und s'' nur noch vom Betrag $|\vec{q}_\perp|$ abhängen. Hiermit ist zu begründen, daß in (2.30) die (noch von s'- und s''-abhängige) Fourieramplitude bei der $\int d\vec{k}_\perp^{\,2}$ - Integration auch nur vom Betrag $|\vec{k}_\perp|$ abhängt. Für die verbleibende s' und s'' Abhängigkeit kann angenommen werden, daß es Funktionen $\varphi(s)$ gibt, so daß in (2.30) nur über Diagonalglieder zu summieren $(\sum_{\nu} \dots)$ und zu integrieren $(\int dk_z \dots)$ ist. Die Form der Integrationsgewichte in (2.30) wird damit begründet, daß im Kerninnern die Kernmaterie-Dichtematrix erreicht werden soll. Die Relation (2.2) ist jetzt leider nicht mehr so einfach nachzurechnen. Wir stellen uns aber vor, daß sie (näherungsweise) erfüllt werden kann, wenn wir noch eine Abhängigkeit der Wellenfunktionen φ selber von der Krümmung $\varkappa$ an der betrachteten Oberflächenstelle annehmen. Diese Abhängigkeit wird später für die Abschätzung der Gesamtenergie keinen merklichen Beitrag liefern, da die Krümmung in einer Art Störungstheorie[19] behandelt werden wird.

Mit den in (2.4), (2.13) und (2.30) angegebenen Dichtematrizen wird im nächsten Kapitel die Gesamtenergie für einen sehr großen Kern ausgewertet. Dabei werden die Wellenfunktionen φ noch von verschiedenen Parametern abhängen. Bezüglich dieser Parameter und ebenso auch bezüglich des Fermiimpulses $\hbar k_0$, der in den Formeln für die Dichtematrix auftritt, ist dann die Gesamtenergie zu minimalisieren.

3) Entwicklung der Gesamtenergie nach $A^{1/3}$ -Potenzen.

a) Aufstellung einer Energiedichte.

In diesem Abschnitt wollen wir den Ausdruck (1.11) aus Kapitel 1 für die Gesamtenergie in eine etwas einfachere Gestalt bringen, in der keine Spin-und Isospinvariable mehr vorkommen. Wir setzen für die effektive Zweiteilchen-Wechselwirkung

$$U = \sum_{S=0}^{1} \sum_{T=0}^{1} U_{ST} P_S P_T \tag{3.1}$$

an, wobei P_S und P_T Projektionsoperatoren auf Singulett-und Triplett-Zustände in den Spin-und Isospinvariablen sind. U_{ST} wirkt nur auf die Ortskoordinaten. Die Matrixelemente von (3.1) sind durch

$$\langle x_1' x_2' | U | x_1'' x_2'' \rangle = \sum_{ST} \langle \vec{r}_1' \vec{r}_2' | U_{ST} | \vec{r}_1'' \vec{r}_2'' \rangle \sum_{M_S M_T} \left(\tfrac{1}{2} \tfrac{1}{2} \middle| \begin{matrix} S \\ M_S \end{matrix} \right) \cdot \left(\begin{matrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \sigma_1'' & \sigma_2'' \end{matrix} \middle| \begin{matrix} S \\ M_S \end{matrix} \right) \left(\begin{matrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \tau_1' & \tau_2' \end{matrix} \middle| \begin{matrix} T \\ M_T \end{matrix} \right) \left(\begin{matrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \tau_1'' & \tau_2'' \end{matrix} \middle| \begin{matrix} T \\ M_T \end{matrix} \right) \tag{3.2}$$

gegeben. Aufsummation über Spin-und Isospinvariable führt zu den Beziehungen

$$\text{a)} \quad \sum_{\sigma_2' \sigma_2''} \sum_{\tau_2' \tau_2''} \langle x_1' x_2' | U | x_1'' x_2'' \rangle \delta_{\sigma_2' \sigma_2''} \delta_{\tau_2' \tau_2''} = \sum_{ST} \langle \vec{r}_1' \vec{r}_2' | U_{ST} | \vec{r}_1'' \vec{r}_2'' \rangle \tfrac{1}{4} (2S+1)(2T+1) \delta_{\sigma_1' \sigma_1''} \delta_{\tau_1' \tau_1''} ,$$

$$\text{b)} \quad \sum_{\sigma_2' \sigma_2''} \sum_{\tau_2' \tau_2''} \langle x_1' x_2' | U | x_2'' x_1'' \rangle \delta_{\sigma_2' \sigma_2''} \delta_{\tau_2' \tau_2''} = \sum_{ST} (-1)^{S+T} \langle \vec{r}_1' \vec{r}_2' | U_{ST} | \vec{r}_2'' \vec{r}_1'' \rangle \tfrac{1}{4} (2S+1)(2T+1) \delta_{\sigma_1' \sigma_1''} \delta_{\tau_1' \tau_1''} , \tag{3.3}$$

mit deren Hilfe die Gesamtenergie (1.11) bei einer durch die Gleichung (2.1) des vorigen Kapitels gegebenen Spin- Isospinabhängigkeit der Einteilchen-Dichtematrix in die Form

$$\begin{aligned} E^A(n) = & \int d\vec{r}^{\,3} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \right) \frac{\partial^2}{\partial \vec{r}^{\,2}} n(\vec{r}', \vec{r}'') \Big|_{\vec{r}''=\vec{r}'=\vec{r}} \\ & + \tfrac{1}{2} \sum_{ST} (2S+1)(2T+1) \cdot \tfrac{1}{16} \int d\vec{r}_1'^{\,3} d\vec{r}_1''^{\,3} d\vec{r}_2'^{\,3} d\vec{r}_2''^{\,3} \; n(\vec{r}_1'', \vec{r}_1') \cdot \\ & \left[\langle \vec{r}_1' \vec{r}_2' | U_{ST} | \vec{r}_1'' \vec{r}_2'' \rangle - (-1)^{S+T} \langle \vec{r}_1' \vec{r}_2' | U_{ST} | \vec{r}_2'' \vec{r}_1'' \rangle \right] n(\vec{r}_2'', \vec{r}_2') \end{aligned} \tag{3.4}$$

gebracht werden kann.

Führen wir nun Schwerpunkts-und Relativkoordinaten

$$\vec{\xi} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \quad , \quad \vec{r} = \tfrac{1}{2}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2) \tag{3.5}$$

ein und nehmen von der Wechselwirkung die Eigenschaft

$$\langle \vec{r}_1' \vec{r}_2' | u_{ST} | \vec{r}_1'' \vec{r}_2'' \rangle = \delta(\vec{r}' - \vec{r}'') \langle \vec{\xi}' | u_{ST} | \vec{\xi}'' \rangle \tag{3.6}$$

an (Impulserhaltung und Galilei-Invarianz), so vereinfacht sich (3.4) zu

$$\begin{aligned} E^A(n) = {} & \int d\vec{r}'^3 \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right) \frac{\partial^2}{\partial \vec{r}_{,2}} n(\vec{r}', \vec{r}'') \Big|_{\vec{r}''=\vec{r}'=\vec{r}} \\ & + \frac{1}{32} \sum_{ST} (2S+1)(2T+1) \int d\vec{r}^3 \, d\vec{\xi}'^3 \, d\vec{\xi}''^3 \, n(\vec{r}+\tfrac{1}{2}\vec{\xi}'', \vec{r}+\tfrac{1}{2}\vec{\xi}') \cdot \\ & \left[\langle \vec{\xi}' | u_{ST} | \vec{\xi}'' \rangle - (-1)^{S+T} \langle \vec{\xi}' | u_{ST} | -\vec{\xi}'' \rangle \right] n(\vec{r}-\tfrac{1}{2}\vec{\xi}'', \vec{r}-\tfrac{1}{2}\vec{\xi}') \end{aligned} \tag{3.7}$$

Hier lohnt es sich, nochmals zu Relativkoordinaten und Schwerpunktskoordinaten überzugehen. Definieren wir Schlangegrößen durch

$$\begin{aligned} \tilde{n}\left(\tfrac{\vec{r}'+\vec{r}''}{2}, \vec{r}' - \vec{r}''\right) &= n(\vec{r}', \vec{r}'') \\ \tilde{u}_{ST}\left(\tfrac{\vec{\xi}'+\vec{\xi}''}{2}, \vec{\xi}' - \vec{\xi}''\right) &= \langle \vec{\xi}' | u_{ST} | \vec{\xi}'' \rangle \end{aligned} \quad , \tag{3.8}$$

und substituieren in (3.7)

$$\begin{aligned} \vec{r}_1 &= \vec{r} + \tfrac{1}{4}(\vec{\xi}' + \vec{\xi}'') \, , \quad \vec{r}_1' = \vec{r} - \tfrac{1}{4}(\vec{\xi}' + \vec{\xi}'') \, , \\ \vec{\xi} &= \tfrac{1}{2}(\vec{\xi}' - \vec{\xi}'') \, ; \quad d\vec{r}^3 d\vec{\xi}'^3 d\vec{\xi}''^3 = 8 \, d\vec{r}_1^3 \, d\vec{r}_1'^3 d\vec{\xi}^3 \, , \end{aligned} \tag{3.9}$$

so erhalten wir die Gesamtenergie

$$(3.10)\qquad E^{A} = \int d\vec{r}^{\,2}\, \eta(\vec{r}) ,$$

$$(3.11)\qquad \eta(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial \vec{r}'^2}\, n(\vec{r}', \vec{r}'')\Big|_{\vec{r}''=\vec{r}'=\vec{r}} + \frac{1}{2}\int d\vec{r}'^{\,3} \int d\vec{\xi}^{\,3}\, \tilde{n}(\vec{r}, -\vec{\xi})\, \tilde{n}(\vec{r}', \vec{\xi})\, \hat{u}(\vec{r}-\vec{r}', 2\vec{\xi}) ,$$

$$(3.12)\qquad \hat{u}(\vec{r}, 2\vec{\xi}) = \frac{1}{2}\sum_{s\tau}(2s+1)(2\tau+1)\left[\tilde{u}_{s\tau}(\vec{r}, 2\vec{\xi}) - (-1)^{s+\tau}\tilde{u}_{s\tau}(\vec{\xi}, 2\vec{r})\right]$$

als Integral über die Energiedichte η . Wir haben bei $\vec{r}_1$ und $\vec{r}_1'$ den Index 1 wieder weggelassen. Für das Einteilchenpotential aus (1.2b) findet man

$$(3.13)\qquad \langle x'|V|x''\rangle = \delta_{\sigma'\sigma''}\,\delta_{\tau'\tau''}\,\tilde{V}\left(\frac{\vec{r}'+\vec{r}''}{2}, \vec{r}'-\vec{r}''\right),$$
$$\tilde{V}(\vec{r}, \vec{\xi}) = \int d\vec{r}'^{\,3}\, \tilde{n}(\vec{r}', \vec{\xi})\, \hat{u}(\vec{r}-\vec{r}', 2\vec{\xi}) .$$

Hiermit vereinfacht sich (3.11) zu

$$(3.14)\qquad \eta(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial \vec{r}'^2}\, n(\vec{r}', \vec{r}'')\Big|_{\vec{r}'=\vec{r}''=\vec{r}} + \frac{1}{2}\int d\vec{\xi}^{\,3}\, \tilde{V}(\vec{r}, \vec{\xi})\, \tilde{n}(\vec{r}, -\vec{\xi}) .$$

In diesen Gleichungen haben wir uns die Dichtematrizen aus dem vorhergehenden Kapitel eingesetzt zu denken.

b) Die Abhängigkeit der Energiedichte von der lokalen Krümmung.

In einem beliebig herausgegriffenen Bereich der Oberfläche sei ein Koordinatensystem wie in Kapitel 2d eingeführt. Wir interessieren uns für die Energiedichte η an der Stelle $\vec{r} = z\vec{e}_z$. Wegen $\vec{r}_1 = \vec{0}$ ist dort $s = z$, d.h. $\eta(z\vec{e}_z)$ gibt die Energiedichte im Abstand z von der Kernoberfläche an. Für spätere Zwecke ist es wichtig, die Abhängigkeit der Energiedichte insbesondere von der Krümmung zu kennen. Die Dichtematrix (2.30) bei gekrümmter Oberfläche unterscheidet sich in zweifacher Hinsicht von der Dichtematrix (2.13) für den ebenen Fall. Erstens hängt die

Dichtematrix in (2.30) explizit von der Krümmung über die Größen s', s'', $|\vec{q}_\perp|$ ab, die sich aus z', z'' und $|\vec{\xi}_\perp|$ durch Hinzunahme krümmungsabhängiger Zusatzglieder ergeben. Zweitens gibt es eine implizite Krümmungsabhängigkeit dadurch, daß der funktionelle Verlauf der Wellenfunktionen $\psi(s)$ noch mit der Krümmung des herausgegriffenen Oberflächenstücks variieren kann. Diesen Sachverhalt drücken wir (zunächst für sphärische Krümmung) durch

$$(3.15) \qquad n_\varkappa(\vec{r}',\vec{r}'') = n(\vec{r}',\vec{r}'') + \varkappa\,\bar{n}_1(\vec{r}',\vec{r}'') + \varkappa\,\bar{n}_2(\vec{r}',\vec{r}'') + \dots$$

aus. Der Index $\varkappa$ auf der linken Seite soll die Dichtematrix bei bestehender Krümmung von der Dichtematrix im ebenen Fall (kein Index) unterscheiden, und $\bar{n}_1$ repräsentiert die eben erläuterte explizite, $\bar{n}_2$ die implizite Krümmungsabhängigkeit.

Für nichtsphärische Krümmung kommt zu $\varkappa\bar{n}_1$ noch ein Term $\iota\hat{n}_1$ hinzu, der die Abhängigkeit von der Differenz $\iota = \frac{1}{R_x} - \frac{1}{R_y}$ der Hauptkrümmungen beschreibt. Wir wollen zunächst die Auswirkungen der Korrektur $\varkappa\bar{n}_1 + \iota\hat{n}_1$ weiter verfolgen und die Frage der impliziten Krümmungsabhängigkeit auf später verschieben. Mit

$$(3.16) \qquad \begin{aligned} s &= z + \tfrac{1}{4}\varkappa\vec{r}_\perp^{\,2} + \tfrac{1}{4}\iota(x^2-y^2) \quad , \quad \iota = \frac{1}{R_x} - \frac{1}{R_y} \quad , \\ \vec{q}_\perp &= \vec{\xi}_\perp - \zeta\cdot\left[\tfrac{\varkappa}{2}\vec{r}_\perp + \tfrac{\iota}{2}(x\vec{e}_x - y\vec{e}_y)\right] \quad , \end{aligned}$$

wobei in der zweiten Zeile $\vec{\xi} = \xi\vec{e}_x + \eta\vec{e}_y + \zeta\vec{e}_z$ für die Relativkoordinate und $\vec{r} = x\vec{e}_x + y\vec{e}_y + z\vec{e}_z$ für die Schwerpunktskoordinate von $\vec{r}', \vec{r}''$ stehen, ergibt sich für die Variation $\delta_1 n = \varkappa\bar{n}_1 + \iota\hat{n}_1$ der Dichtematrix bezüglich der expliziten Krümmungsabhängigkeit

$$(3.17a) \qquad \begin{aligned} \delta_1 n(\vec{r}',\vec{r}'') = \Big\{ &\left[\tfrac{1}{4}\varkappa\vec{r}_\perp'^{\,2} + \tfrac{1}{4}\iota(x'^2-y'^2)\right]\frac{\partial}{\partial z'} + \left[\tfrac{1}{4}\varkappa\vec{r}_\perp''^{\,2} + \right. \\ &\left.\tfrac{1}{4}\iota(x''^2-y''^2)\right]\frac{\partial}{\partial z''} - (z'-z'')\left[\tfrac{\varkappa}{4}(\vec{r}_\perp' + \vec{r}_\perp'') + \tfrac{\iota}{4}(x'+x'')\vec{e}_x \right. \\ &\left. - \tfrac{\iota}{4}(y'+y'')\vec{e}_y\right]\cdot\tfrac{1}{2}\left(\frac{\partial}{\partial\vec{r}_\perp'} - \frac{\partial}{\partial\vec{r}_\perp''}\right)\Big\}\, n(\vec{r}',\vec{r}'') \quad , \end{aligned}$$

und mit den Schlangengrößen

$$\delta_1 \tilde{n}(\vec{r},\vec{\xi}) = \Big\{ \Big[\tfrac{1}{4} x \left(\vec{r}_\perp^{\,2} + \tfrac{1}{4}\vec{\xi}_\perp^{\,2}\right) + \tfrac{1}{4}\iota\left(x^2 - y^2 + \tfrac{1}{4}(\xi^2-\eta^2)\right)\Big] \frac{\partial}{\partial z}$$

$$+ \Big[\tfrac{x}{2}\vec{r}_\perp\cdot\vec{\xi}_\perp + \tfrac{1}{2}(x\xi - y\eta)\Big] \frac{\partial}{\partial \zeta} - \zeta\Big[\tfrac{x}{2}\vec{r}_\perp + \tfrac{1}{2}(x\vec{e}_x - y\vec{e}_y)\Big]\cdot\frac{\partial}{\partial \vec{\xi}_\perp}\Big\}\,\tilde{n}(\vec{r},\vec{\xi}) \,. \tag{3.17b}$$

Hierbei ist auf der rechten Seite dieser Gleichungen stets die Dichtematrix (2.13) für die ebene Oberfläche einzusetzen. Insbesondere verschwindet also die δ_1 - Änderung, wenn gleichzeitig $\vec{\xi}_\perp = \vec{0}$ und $\vec{r}_\perp = \vec{0}$ sind, wie dies zum Beispiel der Fall ist für die Teilchendichte $\delta_1 n(\vec{r},\vec{r}) = \delta_1 \tilde{n}(\vec{r},\vec{0})$ an der Stelle $\vec{r} = z\vec{e}_z$.

Betrachten wir zuerst die Änderung der Dichte der kinetischen Energie, so folgt mit Hilfe von (3.17a) an der Stelle $\vec{r} = z\vec{e}_z$

$$\delta_1 \eta_{kin}(z) = -\frac{\hbar^2}{2m} x \frac{\partial}{\partial z'} n(z'\vec{e}_z, z''\vec{e}_z)\Big|_{z'=z''=z}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{2} x \frac{\partial}{\partial z}\tilde{n}(z\vec{e}_z,\vec{0}) = x\,\overline{\eta}_{1\,kin}(z) \,. \tag{3.18}$$

Dieser Ausdruck hängt nicht mehr von der Differenz ι der reziproken Hauptkrümmungsradien ab. Ebensowenig erscheint ι in der Krümmungskorrektur für die potentielle Energiedichte in (3.11), sobald man nur voraussetzt, daß das Matrixelement $\langle \vec{\xi}' | u_{st} | \vec{\xi}'' \rangle$ seinen Wert nicht ändert, wenn sowohl $\vec{\xi}'$ als auch $\vec{\xi}''$ derselben Drehung unterworfen werden. Für die verbleibende x -Abhängigkeit finden wir

$$\delta_1 \eta_{pot}(z) = x\,\overline{\eta}_{1\,pot}(z) = x\left[\overline{\eta}_{1a}(z) + \overline{\eta}_{1b}(z) + \overline{\eta}_{1c}(z)\right] \tag{3.19}$$

mit

$$\overline{\eta}_{1a}(z) = \frac{1}{32}\int dz'\, d\vec{r}_\perp'^{\,2} \int d\vec{\xi}^{\,3}\; \vec{\xi}_\perp^{\,2}\,\frac{\partial}{\partial z}\Big[\hat{n}(z,-\vec{\xi})\,\tilde{n}(z',\vec{\xi})\cdot \hat{u}\left((z-z')\vec{e}_z - \vec{r}_\perp', 2\vec{\xi}\right)\Big] \,, \tag{3.19a}$$

$$\bar{\eta}_{1b}(z) = \frac{1}{16}\int dz'\, d\vec{r}_\perp'^{\,2} \int d\vec{\xi}^{\,3}\; \vec{r}_\perp'^{\,2}\, \tilde{n}(z,-\vec{\xi})\,\tilde{n}(z',\vec{\xi})\cdot \left(\frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial z'}\right) \hat{u}\left((z-z')\vec{e}_z - \vec{r}_\perp' \;\; 2\vec{\xi}\right) \quad , \tag{3.19b}$$

$$\bar{\eta}_{1c}(z) = \frac{1}{4}\int dz'\, d\vec{r}_\perp'^{\,2} \int d\vec{\xi}^{\,3}\; \tilde{n}(z,-\vec{\xi})\,\hat{u}\left((z-z')\vec{e}_z - \vec{r}_\perp', 2\vec{\xi}\right)\cdot (\vec{r}_\perp' \times \vec{e}_z)\cdot\left(\vec{\xi} \times \frac{\partial}{\partial \vec{\xi}}\right)\tilde{n}(z',\vec{\xi}) \quad . \tag{3.19c}$$

Wir werden uns unten auf eine Wechselwirkung beschränken, die nur von den Beträgen $|\vec{r}|$ und $|\vec{\xi}|$ abhängt. Für solche Wechselwirkungen verschwindet der Anteil $\bar{\eta}_{1c}$ als Integral über eine ungerade Funktion von $\vec{r}_\perp'$.

c) Die Gesamtenergie in Abhängigkeit von Kerngestalt und Dichteverlauf.

Für den Bereich des Kerninnern wird mit der Kernmaterie-Dichtematrix (2.4) durch die Gleichung (3.11) eine Mittelpunktsenergiedichte $\eta_\circ$ definiert. Bezeichnet $n(\vec{r}) = \tilde{n}(\vec{r},\vec{0})$ die Teilchendichte und $n_\circ$ die durch (2.7) gegebene Mittelpunktsdichte, so ist in der Aufspaltung

$$E^A(n) = \frac{\eta_\circ}{n_\circ} A + \int d\vec{r}^{\,3}\left[\eta(\vec{r}) - \frac{\eta_\circ}{n_\circ} n(\vec{r})\right] \tag{3.20}$$

für die Gesamtenergie E^A eines A -Teilchen-Systems die Integration im zweiten Summand auf die Oberflächenzone beschränkt. Wir denken uns die Kernoberfläche dadurch charakterisiert, daß auf ihr die Teilchendichte $n(\vec{r})$ konstant ist und das von ihr umschlossene Volumen $V_\circ$ bei konstanter Dichte $n_\circ$ gerade A Teilchen enthalten würde[32], also

$$V_\circ = A/n_\circ \tag{3.21}$$

Von dieser Kernoberfläche soll angenommen werden, daß sie in eine Schar Steinerscher Flächen eingebettet werden kann. Mit dem den Abstand von der Oberfläche messenden Parameter s ist das Volumenelement durch

(3.22) $\quad d\vec{r}^3 = ds\, dF_s$

auszudrücken, wobei dF_s das Flächenelement der zu s gehörenden Steinerschen Fläche ist. In der entsprechend (3.20) gebildeten Formel

(3.23) $\quad E = \frac{\eta_0}{n_0} A + \int ds\, dF_s \left[\eta(s;\varkappa) - \frac{\eta_0}{n_0} n(s;\varkappa)\right]$

für die Gesamtenergie haben wir nach den Überlegungen im vorigen Abschnitt 3b

(3.24) $\quad \eta(s,\varkappa) = \eta(s) + \delta\eta(s) + \ldots \quad ,$
$\quad n(s,\varkappa) = n(s) + \delta n(s) + \ldots$

einzusetzen. Der Unterschied zwischen der Krümmung $\varkappa$ an der Stelle $s = 0$ und der Krümmung $\varkappa_s$ bei s ist gegenüber $\varkappa$ selbst als klein anzunehmen. So finden wir, wenn wir $\delta\eta(s) = \varkappa\, \bar{\eta}(s)$ und $\delta n(s) = \varkappa\, \bar{n}(s)$ schreiben,

(3.25) $\quad E = \frac{\eta_0}{n_0} A + \int ds\, dF_s \left[\eta(s) - \frac{\eta_0}{n_0} n(s)\right]$
$\quad + \int ds\, dF_s\, \varkappa_s \left[\bar{\eta}(s) - \frac{\eta_0}{n_0} \bar{n}(s)\right] + \ldots$

Der Flächeninhalt $F(s)$ der Fläche zum Parameter s ist durch $\int dF_s$ gegeben, während das Integral $\int dF_s\, \varkappa_s$ die (totale) Krümmung $L(s)$ der Fläche s ergibt. Näherungsweise ist $F(s) = F(0) + s L(0) + \ldots$ und $L(s) = L(0) + \ldots$ [32,44].
In der Gleichung

(3.26) $\quad E = \frac{\eta_0}{n_0} A + F(0) \int ds \left[\eta(s) - \frac{\eta_0}{n_0} n(s)\right]$
$\quad + L(0) \int ds \left\{ s \left[\eta(s) - \frac{\eta_0}{n_0} n(s)\right] \right.$
$\quad \left. + \bar{\eta}(s) - \frac{\eta_0}{n_0} \bar{n}(s) \right\} + \ldots$

wurden Terme weggelassen, die bei einer sphärischen Kerngestalt ($F(0) = 4\pi R_0^2$, $L(0) = 8\pi R_0$) für $R_0 \to \infty$ beschränkt bleiben.

Definieren wir, auch für nichtsphärische Kerngestalten, einen Radius R_0 durch

$$n_0 \tfrac{4\pi}{3} R_0^3 = A = n_0 V_0 \,, \tag{3.27}$$

so sind $F(0)$ und $L(0)$ durch

$$\begin{aligned} F(0) &= A^{2/3} 4\pi r_0^2 \varphi_s(g) \,, \\ L(0) &= A^{1/3} 8\pi r_0 \varphi_\kappa(g) \,, \\ r_0 &= [3/(4\pi n_0)]^{1/3} = R_0 A^{-1/3} \end{aligned} \tag{3.28}$$

gegeben. Die nur noch von der Kerngestalt g (sie ist definiert bis auf Ähnlichkeitstransformationen) abhängigen Größen $\varphi_s(g) = \frac{F(0)}{4\pi R_0^2}$ und $\varphi_\kappa(g) = \frac{L(0)}{8\pi R_0}$ nehmen für die Kugelgestalt den Wert 1 an. Für die Gesamtenergie folgt

$$E = \alpha_0 A + \beta_0 A^{2/3} \varphi_s(g) + \gamma_0 A^{1/3} \varphi_\kappa(g) + \dots \,, \tag{3.29}$$

$$\alpha_0 = \eta_0/n_0 = \tfrac{4\pi}{3} r_0^3 \eta_0 \,,$$

$$\begin{aligned} \beta_0 &= 4\pi r_0^2 \sigma_0 \,, \\ \gamma_0 &= 8\pi r_0 \lambda_0 \end{aligned} \tag{3.30}$$

mit der (noch von Variationsparametern abhängigen) Oberflächenspannung σ_0 und Krümmungsspannung λ_0, die aus

$$\begin{aligned} \sigma_0 &= \int ds \, [\eta(s) - (\eta_0/n_0) n(s)] \,, \\ \lambda_0 &= \int ds \, \{ s \cdot [\eta(s) - (\eta_0/n_0) n(s)] \\ &\quad + \bar{\eta}(s) - (\eta_0/n_0) \bar{n}(s) \} \end{aligned} \tag{3.31}$$

zu berechnen sind. In (3.29) wurden Beiträge weggelassen, die für $A^{1/3} \to \infty$ beschränkt bleiben.

Die Forderung (3.21) bedeutet eine Bedingung an die Zählung der Koordinate s,

$$\int ds\, dF_s\, [\, n(s;z) - n_0\, \theta(-s)\,] \;=\; \sigma$$

(3.32)

$$= F(0) \int ds\, [\, n(s) - n_0\, \theta(-s)\,] + \ldots \quad .$$

Ist z eine andere Numerierung mit $s = z - z_0$, so muß

$$0 \;=\; F(0) \int dz\, [\, n(z) - n_0\, \theta(z_0 - z)\,] + \ldots \quad ,$$

(3.32a)

$$z_0 \;=\; \int dz\, [\, n(z)/n_0 \;-\; \theta(-z)\,] + \ldots$$

gelten. Entsprechend ist (3.31) durch

$$\sigma_0 \;=\; \int dz\, [\, \eta(z) - (\eta_0/n_0)\, n(z)] \quad ,$$

(3.31a)

$$\lambda_0 \;=\; \int dz\, \{\, (z - z_0)\, [\, \eta(z) - (\eta_0/n_0)\, n(z)]$$

$$+\; \bar{\eta}(z) \;-\; (\eta_0/n_0)\, \bar{n}(z)\,\}$$

zu ersetzen.

d) Minimalisierung der Gesamtenergie.

Um das Minimum der Energie (3.29) zu finden, müssen wir zunächst nach den Parametern fragen, von denen die Koeffizienten $\alpha_0, \beta_0, \gamma_0$ noch abhängen. Es ist klar, daß die Energie pro Teilchen in Kernmaterie $\alpha_0 = \eta_0/n_0$ nur vom Fermiimpuls $\hbar k_0$ abhängt, weil η_0 und n_0 Größen der homogenen Kernmaterie sind. Für ein bestimmtes $k_0 = k_c$ hat α_0 ein Minimum; dieses k_c definiert die Sättigungsdichte n_c der Kernmaterie. Für sehr große Kerne wird k_0 nur wenig von k_c abweichen. Wir denken uns α_0 um k_c entwickelt, vgl. Abbildung 1 auf Seite 125,

$$\alpha_0 \;=\; \alpha_c \;+\; \tfrac{1}{2}\, \mu_c\, (k_0 - k_c)^2 + \ldots \qquad (3.33)$$

mit dem Sättigungswert $\alpha_c = \eta_c / n_c$. Der Koeffizient μ_c ist ein Maß für die Kompressibilität der Kernmaterie. Auch die

anderen Größen β_0 und γ_0 (und ebenso auch σ_0 und λ_0) hängen von k_0 ab. Außerdem hängen β_0 und γ_0 noch ab vom Verhalten der aus den Wellenfunktionen ψ aufgebauten Dichtematrix n in der Oberflächenregion.

Wir denken uns die Wellenfunktionen ψ gegeben als Lösung einer (eindimensionalen) Einteilchengleichung. Es repräsentiere a einen Satz von Parametern, die das Einteilchenpotential und damit auch die Dichtematrix im betrachteten Ausschnitt aus der Oberfläche charakterisieren. Auf diese Weise ist die Dichtematrix n abgesehen von ihrer expliziten Ortsabhängigkeit auch noch als Funktion von a zu denken: $n = n(\vec{q}_2, s', s''; k_0, a)$. Der Parametersatz a wird dabei von Ort zu Ort verschieden zu wählen sein, je nachdem, wie groß die Krümmung $\varkappa$ an der betrachteten Stelle ist. Dies ergibt die implizite Abhängigkeit der Dichtematrix von der Krümmung, also den Term $\varkappa \bar{n}_2$ in (3.15) (vgl. auch den vorletzten Absatz in Kapitel 2d). In erster Näherung werden wir

$$a = a_0 + \varkappa \bar{a} + \dots \qquad (3.34)$$

ansetzen. Bedeutet a zum Beispiel einen Parameter, der die Breite des Dichteabfalls in der Oberflächenzone beschreibt, so wird $\bar{a}$ je nach seinem Vorzeichen verschiedene räumliche Gestalten der Dichteverteilung bewirken. In der folgenden Skizze sind Flächen konstanter Dichte dargestellt für

$\bar{a} > 0$, $\bar{a} = 0$, $\bar{a} < 0$.

Skizze 3

Zur Berechnung von β_0 ist die Krümmung $\varkappa$ null zu setzen. Wir definieren a_c durch

$$\left.\frac{\partial \beta_0(k_0,a)}{\partial a}\right|_{\substack{k_0=k_c\\ a=a_c}} = 0 \quad , \tag{3.35}$$

so daß für alle k_0 und a_0 in einer Umgebung von k_c und a_c die Entwicklung

$$\beta_0(k_0,a_0) = \beta_c + \nu_k(k_0-k_c) + \tfrac{1}{2}\left[\nu_{kk}(k_0-k_c)^2 + 2\nu_{ak}(k_0-k_c)(a_0-a_c) + \nu_{aa}(a_0-a_c)^2\right] + \ldots \tag{3.36}$$

gilt. Das in (a_0-a_c) lineare Glied fehlt wegen (3.35), und es ist natürlich $\beta_c = \beta_0(k_c,a_c)$ zu nehmen. Besteht der durch a_0 repräsentierte Parametersatz aus mehr als einer Variablen, so stellt ν_{ak} einen Vektor und ν_{aa} eine Matrix dar.

Betrachten wir nun die Krümmungsspannung λ_0 in (3.31). Sie wird außer von k_0 und a_0 auch noch von $\bar{a}$ abhängen. Der von $\bar{a}$ abhängige Anteil ist durch das Integral

$$\bar{\lambda}_2(k_0,a_0,\bar{a}) = \int dz\left[\bar{\eta}_2(z) - (\eta_0/n_0)\,\bar{n}_2(z)\right] \tag{3.37}$$

über Dichten gegeben, die gemäß der Aufspaltung (3.15) die implizite Krümmungsabhängigkeit beschreiben. Wir erhalten $\bar{\lambda}_2$ aus den ebenen Dichten $\eta(z)$ und $n(z)$ mit (3.34) einfach durch Differentiation:

$$\begin{aligned}\bar{\lambda}_2 &= \bar{a}\,\frac{\partial}{\partial a}\int dz\left[\eta(z;k_0,a) - (\eta_0/n_0)\,n(z;k_0,a)\right]\Big|_{a=a_0}\\ &= \bar{a}\,\frac{\partial}{\partial a}\left[\beta_0(k_0,a)/(4\pi r_0^2)\right]\Big|_{a=a_0} .\end{aligned} \tag{3.38}$$

Dies verschwindet nach (3.35) für $k_0 = k_c$ und $a_0 = a_c$ und beliebiges $\bar{a}$.

Entwickeln wir daher den Gesamtausdruck $\gamma_0 = \beta\pi r_0 \lambda_0$ an der Stelle $k_0 = k_c$, $a_0 = a_c$ und $\bar{\alpha} = \sigma$, so ergibt sich

$$(3.39) \qquad \gamma_0(k_0, a_0, \bar{\alpha}) = \gamma_c + (k_0 - k_c)\gamma_k + (a_0 - a_c)\gamma_a + \dots ,$$

wenn wir in $(k_0 - k_c)$, $(a_0 - a_c)$ und $\bar{\alpha}$ quadratische Terme weglassen, mit

$$\gamma_c = \beta\pi r_c \lambda_c ,$$

$$(3.40) \qquad \lambda_c = \int dz\, (z - z_c)\left[\eta(z; k_c, a_c) - (\eta_c/n_c)\, n(z; k_c, a_c)\right] + \bar{\lambda}_1(k_c, a_c)$$

Hier berücksichtigt das verbleibende Glied

$$(3.41) \qquad \bar{\lambda}_1(k_c, a_c) = \int dz\, \bar{\eta}_1(z; k_c, a_c)$$

die explizite Krümmungsabhängigkeit der Dichtematrix ($\bar{\eta}_1$ in (3.15)) und ist mit (3.18) und (3.19) zu berechnen. In (3.41) haben wir $-(\eta_c/n_c)\,\bar{n}_1(z; k_c, a_c)$ gleich weggelassen, da es nach der im Anschluß an Gleichung (3.17b) gemachten Bemerkung ohnehin verschwindet.

Die vorhergehenden Überlegungen einschließlich des die Gleichung (3.33) enthaltenden Absatzes hatten nur den Zweck, verschiedene Größen α_c, k_c, β_c, a_c, γ_c usw. zu definieren und die Entwicklungen (3.33), (3.36) und (3.39) zu begründen. Diese Entwicklungen denken wir uns jetzt in den Ausdruck (3.29) für die Gesamtenergie eingesetzt. Variation bezüglich k_0 und a_0 ergibt die Bedingungsgleichungen

$$
\begin{aligned}
0 &= [\mu_c (k_0 - k_c) + \dots] + [\nu_k + \nu_{kk}(k_0 - k_c) \\
&\quad + \nu_{ak}(a_0 - a_c) + \dots] \varphi_s A^{-1/3} + [\gamma_k + \dots] \varphi_k A^{-2/3} + \dots \quad , \\
0 &= [\nu_{ak}(k_0 - k_c) + \nu_{aa}(a_0 - a_c) + \dots] \varphi_s \\
&\quad + [\gamma_a + \dots] \varphi_k A^{-1/3} + \dots
\end{aligned}
\tag{3.42}
$$

mit der Lösung

$$
\begin{aligned}
k_0 &= k_c - \frac{\nu_k}{\mu_c} \varphi_s A^{-1/3} + \dots \quad , \\
a_0 &= a_c + \nu_{aa}^{-1} \left[\frac{\nu_{ak} \nu_k}{\mu_c} \varphi_s - \gamma_a \frac{\varphi_k}{\varphi_s} \right] A^{-1/3} + \dots \quad .
\end{aligned}
\tag{3.43}
$$

Hier haben wir höhere Potenzen von $A^{-1/3}$ weggelassen. Für mehr als eine Veränderliche im Parametersatz a_0 steht ν_{aa}^{-1} für das Inverse der entsprechenden symmetrischen Matrix und ν_{ak} sowie γ_a für einen Vektor. Schließlich folgt für die Gesamtenergie im Minimum

$$
\begin{aligned}
E^A &= A \cdot \{ \alpha_c + \beta_c \varphi_s A^{-1/3} \\
&\quad + [\gamma_c \varphi_k + \frac{\nu_k^2}{2\mu_c} ((\varphi_s - 1)^2 - 1)] A^{-2/3} + \dots \}
\end{aligned}
\tag{3.44}
$$

bis auf Terme der Ordnung $(A^{-1/3})^3$ in der geschweiften Klammer. Wir nennen α_c die Energie pro Teilchen für abgesättigte Kernmaterie, β_c die spezifische Oberflächenenergie, und γ_c die spezifische Krümmungsenergie. Entsprechend wäre dann

$$
\gamma_c = \frac{\nu_k^2}{2\mu_c} \tag{3.45}
$$

etwa als spezifische Komprimierungsenergie zu bezeichnen.

Um die Gleichungen nicht noch unübersichtlicher werden zu lassen, haben wir in unseren Überlegungen stillschweigend angenommen, daß die implizite Abhängigkeit der Dichtematrix von der Krümmung nur über die Summe $\varkappa = \frac{1}{R_x} + \frac{1}{R_y}$ der reziproken Krümmungsradien R_x^{-1} und R_y^{-1} zu beschreiben ist. Es ist aber leicht zu sehen, daß durch Hinzufügen einer Abhängigkeit $\iota \hat{\alpha}$ in (3.34) von der Differenz $\iota = \frac{1}{R_x} - \frac{1}{R_y}$ nichts am Ergebnis (3.44) geändert wird. Zwar käme in (3.26) ein Beitrag $J(0) \int ds [\hat{\eta}_2(s) - (\eta_0/n_0) \hat{n}_2(s)]$

mit $J(o) = \int dF_s \, \iota \Big|_{s=o}$ hinzu. Er ist jedoch an der Stelle $k_o = k_c$, $a_o = a_c$ (nach (3.43)) auszuwerten und verschwindet dort in gleicher Weise wie $\bar{\lambda}_2$ nach (3.37) und (3.38).

Diese Überlegungen erinnern an die zeitunabhängige Störungstheorie. Ohne Berücksichtigung der Krümmung ist die Gesamtenergie durch $\alpha_c A + \beta_c A^{2/3} \varphi_s$ gegeben, wobei in β_c als Integral über eine Energie-Teilchen-Dichte die ungestörten Wellenfunktionen ψ vorkommen. Nach Einschalten der Krümmung kommt in erster Näherung eine Korrektur $L(o) \int ds \{ s[\eta(s) - \frac{\eta_c}{n_c} n(s)] + \bar{\eta}_1(s) \}$ hinzu, zu deren Auswertung aber auch wieder nur die schon für β_c benutzen ungestörten Wellenfunktionen benötigt werden.

Suchen wir nach dem Minimum von (3.44) bezüglich Gestaltänderung, so ist eine Möglichkeit sicherlich durch die Kugelgestalt wegen ihrer hohen Symmetrie gegeben. Ob es außerdem noch andere Minima mit deformierter Gestalt und eventuell noch tieferer Energie gibt, ist fraglich aber vielleicht nicht ausgeschlossen. Die Berechnung von Sattelpunktsdeformationen in der Kernspaltung kann ebenfalls mit Hilfe von (3.44) geschehen[34], denn an diesen Punkten wird E^A ja stationär. Was für eine genaue Bedeutung die Formel (3.44) für beliebige Deformationen hat, könnte vielleicht in einer zeitabhängigen (Hartree-Fock-) Theorie erklärt werden.

4) Spezialisierung auf eine bestimmte Gestalt der Wechselwirkung.

a) Ansatz für die Wechselwirkung.

Wir wählen eine effektive Wechselwirkung $\tilde{u}_{sr}$ mit den Eigenschaften

$$\begin{aligned} \tilde{u}_{00} &= \tilde{u}_{11} = \sigma \quad , \\ \tilde{u}_{01} &= \tilde{u}_{10} = \tfrac{1}{6}\,\tilde{u} \quad . \end{aligned} \tag{4.1}$$

Sie wirkt nur auf Ortszustände mit gerader Parität. Für die Ortsabhängigkeit wird eine Summe von Kastenpotentialen angesetzt

$$\begin{aligned} \tilde{u}(\vec{r},\vec{\xi}) = \; & 6 \sum_{i=1}^{2} \Big\{ V_i\, a_i^{-6} \left(\tfrac{3}{4\pi}\right)^2 2^{-3}\, \theta\!\left(1-\tfrac{\vec{r}^{\,2}}{a_i^2}\right)\theta\!\left(1-\tfrac{\vec{\xi}^{\,2}}{(2a_i)^2}\right) \\ & + W_i \left[a_i^{-3}\left(\tfrac{3}{4\pi}\right)\theta\!\left(1-\tfrac{\vec{r}^{\,2}}{a_i^2}\right) - \delta(\vec{r})\right]\cdot\left[a_i^{-3}\left(\tfrac{3}{4\pi}\right)\cdot \right. \\ & \left. \cdot\, 2^{-3}\,\theta\!\left(1-\tfrac{\vec{\xi}^{\,2}}{(2a_i)^2}\right) - \delta(\vec{\xi})\right] \Big\} \quad . \end{aligned} \tag{4.2}$$

Als Parameter hat man V_1, V_2, W_1, W_2 und a_1, a_2 . Sie werden später an Kernmaterie-und Oberflächeneigenschaften angepaßt. Der Ansatz (4.2) hat die Symmetrie

$$\tilde{u}(\vec{r}, 2\vec{\xi}) = \tilde{u}(\vec{\xi}, 2\vec{r}) \quad , \tag{4.3}$$

so daß im Ausdruck für die Dichte der potentiellen Energie (3.11), (3.12) der Austauschterm denselben Beitrag wie der Direktterm ergibt. Der Faktor $\frac{1}{6}$ in Gleichung (4.1) ist so gewählt, daß die Gleichung

$$\hat{u}(\vec{r}, 2\vec{\xi}) = \tilde{u}(\vec{r}, 2\vec{\xi}) \tag{4.4}$$

richtig ist. $\hat{u}$ ist bereits durch (3.12) definiert worden. Für einige der folgenden Gleichungen wird der spezielle Ansatz (4.2) nicht verwendet, es genügt meistens, daß das Matrixelement $\langle \vec{\xi}' | \tilde{u}_{sr} | \vec{\xi}'' \rangle$

bei gleichzeitiger Drehung von $\vec{\xi}'$ und $\vec{\xi}''$ oder gleichzeitiger Spiegelung in sich übergeht, vgl. etwa die Relationen (4.17) bis (4.23) unten.

b) Kernmateriegrößen.

Wir wenden uns nun den aus dem Ansatz (4.2) folgenden Kernmaterieeigenschaften zu. Die Dichtematrix für Kernmaterie ist durch (2.4), (2.6) gegeben. Sie läßt sich als sphärische Besselfunktion schreiben

$$\tilde{n}(\vec{r},\vec{\xi}) = n_0 \frac{3}{k_0|\vec{\xi}|} j_1(k_0|\vec{\xi}|) = \tilde{n}(\vec{\xi}) \quad , \tag{4.5}$$
$$\tilde{n}(\vec{0}) = \frac{2}{3\pi^2} k_0^3 = n_0$$

und hängt nicht mehr von der Schwerpunktskoordinate $\vec{r}$ ab.

Die Dichte der kinetischen Energie (3.11) ergibt sich einfach zu

$$\eta_{0\,kin} = \frac{3}{5}\left(\frac{\hbar^2}{2m} k_0^2\right) n_0 \quad . \tag{4.6}$$

Das in (3.13) definierte Einteilchenpotential $\tilde{V}(\vec{r},\vec{\xi})$ hängt im Kerninnern wie die Dichtematrix ebenfalls nicht von $\vec{r}$ ab. Der durch die Kraftkonstanten W_i charakterisierte Anteil der effektiven Wechselwirkung hat dabei keinen Einfluß auf das Einteilchenpotential, weil die $\int d\vec{r}'^3$ -Integration in (3.13) keinen Beitrag liefert. Wir erhalten nach Weglassen der Schwerpunktskoordinate $\vec{r}$

$$\tilde{V}(\vec{\xi}) = \tilde{n}(\vec{\xi})\,\tilde{H}(\vec{\xi}) \tag{4.7}$$

mit der nur vom Betrag $|\vec{\xi}|$ von $\vec{\xi}$ abhängenden Funktion

$$\tilde{H}(\vec{\xi}) = \int d\vec{r}^{\,3}\, \hat{u}(\vec{r},2\vec{\xi}) \quad . \tag{4.8}$$

Ebenso hängt $\tilde{V}$ nur von $|\vec{\xi}|$ ab. Schreiben wir $\tilde{V}$ und $\tilde{H}$ als Fourierintegrale

$$\begin{aligned} \tilde{H}(\vec{\xi}) &= \left(\frac{1}{2\pi}\right)^3 \int d\vec{k}^3\, e^{i\vec{k}\vec{\xi}}\, H(k) \\ \tilde{V}(\vec{\xi}) &= \left(\frac{1}{2\pi}\right)^3 \int d\vec{k}^3\, e^{i\vec{k}\vec{\xi}}\, V(k) \end{aligned} \tag{4.9}$$

mit $k = |\vec{k}|$, so finden wir

$$H(k) = \frac{3}{4} \sum_{i=1}^{2} V_i \frac{3}{a_i k} j_1(a_i k) \,. \tag{4.10}$$

Wegen (4.7) erhält man $V(k)$ als Faltung

$$V(k) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^3 \int d\vec{k}'^3 n(k')\, H(|\vec{k} - \vec{k}'|) \tag{4.11}$$

mit dem Ergebnis

$$V(k) = n_0 \frac{3}{4} \sum_{i=1}^{2} V_i\, A_1(a_i k, a_i k_0) \,, \tag{4.12}$$

wobei die Funktion

$$\begin{aligned} A_1(y, y_0) = \frac{9}{2}\, y_0^{-3} y^{-1} \{ & y\, Si(y_0 + y) + y\, Si(y_0 - y) \\ & + \cos(y_0 + y) - \cos(y_0 - y) \} \end{aligned} \tag{4.13}$$

auf $\lim_{y_0 \to 0} A_1(y_0, y_0) = 1$ normiert ist. A_1 ist für $y_0 \neq 0$ als Funktion von y analytisch. Schließlich findet man für die Dichte der potentiellen Energie nach (3.14) mit

$$\eta_{0\,pot} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2\pi}\right)^3 \int d\vec{k}^3\, V(k)\, n(k) \tag{4.14}$$

die Beziehung

$$\eta_{0\,pot} = \frac{1}{2} n_0^2 \frac{3}{4} \sum_{i=1}^{2} V_i\, A_2(a_i k_0) \,. \tag{4.15}$$

Die Funktion

$$A_2(y_0) = \frac{3}{2} y_0^{-6} \{ 2y_0^3 Si(2y_0) + y_0^2 \cos(2y_0) + 2y_0 \sin(2y_0) + \cos(2y_0) - 1 - 3y_0^2 \} \tag{4.16}$$

ist wieder auf $A_2(0) = 1$ normiert und für alle y_0 analytisch.

Als nächster Punkt interessiert hier die Energie pro Teilchen und ihr Verhalten nach (3.33). Ohne zunächst auf den speziellen Ansatz (4.2) bezug zu nehmen, findet man

$$\alpha_0 = \eta_0/n_0 = \frac{3}{5} \frac{\hbar^2}{2m} k_0^2 + \frac{3\pi^2}{2} k_0^{-3} \cdot \frac{1}{2} \cdot 16 \cdot \frac{1}{(2\pi)^6} \cdot \int d\vec{k}'^3 d\vec{k}''^3 H(|\vec{k}'-\vec{k}''|) \Theta(k_0^2-\vec{k}'^2) \Theta(k_0^2-\vec{k}''^2) \tag{4.17}$$

Nach k_0 Differenzieren ergibt

$$\frac{d\alpha_0}{dk_0} = 3 k_0^{-1} [-\alpha_0 + \frac{\hbar^2}{2m} k_0^2 + V(k_0)] , \tag{4.18}$$

wobei $V(k_0)$ nach (4.12) mit $k = k_0$ zu berechnen ist. Die Einteilchenenergie

$$\varepsilon(k) = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 + V(k) , \tag{4.19}$$

speziell für $k = k_0$ ausgewertet,

$$\varepsilon_0 = \varepsilon(k_0) , \tag{4.20}$$

nennt man Fermienergie. Für $k_0 = k_c$ ist mit (4.18)

$$\alpha_c = \varepsilon_c = \varepsilon(k_c) , \tag{4.21}$$

da k_c durch die Lage des Minimums der Energie pro Teilchen definiert ist, vgl. Gleichung (3.33) (Theorem von Hugenholtz-van Hove[45]). Schließlich bilden wir noch die zweite Ableitung

(4.22) $$\frac{d^2\alpha_0}{dk_0^2} = -12\,k_0^{-2}(-\alpha_0+\varepsilon_0) + 3\,k_0^{-1}\frac{d\varepsilon_0}{dk_0} \quad .$$

Zur Berechnung von $\frac{d\varepsilon_0}{dk_0}$ ist hier auch nach der impliziten Abhängigkeit des Potentials $V(k)$ von k_0 zu differenzieren, vgl. (4.12). Wir erhalten für $k_0 = k_c$ die Kompressibilitätsgröße

(4.23) $$\mu_c = 3\,k_c^{-1}\left.\frac{d\varepsilon_0}{dk_0}\right|_{k_0=k_c} \quad ,$$

die sich mit dem Ansatz (4.2) und (4.20), (4.19) und (4.12) zu

(4.24) $$\mu_c = 3k_c^{-2}\left[2\frac{\hbar^2}{2m}k_c^2 + 3n_c\frac{3}{4}\sum_{i=1}^{2}V_i A_3(a_i k_c)\right]$$

ergibt. Die Funktion

(4.25) $$A_3(y_0) = \frac{3}{2}y_0^{-4}\left\{1-\cos(2y_0)-y_0\sin(2y_0)\right\}$$

ist auf $A_3(0) = 1$ normiert und überall analytisch. Der Koeffizient μ_c steht auf folgende Weise in Beziehung zu sonst noch gebräuchlichen Kompressibilitätsgrößen

(4.26) $$k_c^2\mu_c = r_0^2\left.\frac{\partial^2\alpha_0}{\partial r_0^2}\right|_{r_0=r_c} = 9\,n_0^2\left.\frac{\partial^2\alpha_0}{\partial n_0^2}\right|_{n_0=n_c} \quad .$$

Für die thermodynamische Kompressibilität

(4.27) $$\chi_{Th} = -V\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T = V\left(\frac{\partial^2 F}{\partial V^2}\right)_T$$

ergibt sich (bei der Temperatur $T = 0$) mit der freien Energie $F = \alpha_0 A - TS$ und $V = A/n_0$ bei der Sättigungsdichte n_c

(4.28) $$\chi_{Th} = n_c^3\left.\frac{\partial^2\alpha_0}{\partial n_0^2}\right|_{n_0=n_c} = \frac{1}{9}n_c k_c^2\mu_c$$

Die Fermienergie $\varepsilon_c = \varepsilon(k_c)$ und die Energie pro Teilchen

$$
\begin{aligned}
\varepsilon_c &= \frac{\hbar^2}{2m} k_c^2 + n_c \frac{3}{4} \sum_{i=1}^{2} V_i A_1(a_i k_c, a_i k_c) , \\
\alpha_c &= \frac{3}{5} \frac{\hbar^2}{2m} k_c^2 + \frac{1}{2} n_c \frac{3}{4} \sum_{i=1}^{2} V_i A_2(a_i k_c)
\end{aligned}
\tag{4.29}
$$

hängen linear von V_1 und V_2 ab. Gibt man die Längen a_1 und a_2 sowie den Fermiimpuls $\hbar k_c$ und die Energie α_c $(= \varepsilon_c)$ vor, so kann man V_1 und V_2 mit Hilfe dieses linearen Gleichungssystems bestimmen. Die Kompressibilitätsgröße μ_c ergibt sich dann aus (4.24) und (4.25).

c) Der analytisch berechenbare Anteil der Krümmungsspannung.

Zu den analytisch auswertbaren, nicht vom speziellen Dichteverlauf in der Oberfläche abhängigen Größen gehört auch der Beitrag $\overline{\lambda}_1 = \int dz\, \overline{\eta}_1(z)$ in (3.40) zur Krümmungsspannung. Für den kinetischen Anteil nach (3.18) ergibt sich einfach

$$
\int dz\, \overline{\eta}_{1\,kin}(z) = \frac{1}{2} \frac{\hbar^2}{2m} n_c \, .
\tag{4.30}
$$

Im potentiellen Anteil nach (3.19) fällt der letzte Term $\overline{\eta}_{1c}$ weg, weil nach dem speziellen Ansatz (4.2) die Wechselwirkung $\hat{u}(\vec{r}, 2\vec{\xi})$ in bezug auf $\vec{r}$ nur noch vom Betrag $|\vec{r}|$ abhängt.

Der Rest besteht aus zwei Anteilen

$$
\int dz\, \overline{\eta}_{1\,rest}(z) = \int dz\, \overline{\eta}_{1a}(z) + \int dz\, \overline{\eta}_{1b}(z) = \lambda_a + \lambda_b \, ,
\tag{4.31}
$$

von denen der erste durch

$$
\lambda_a = -\frac{1}{32} \int dz'^3 \int d\vec{\xi}^{\,3}\, \tilde{n}(\vec{\xi})\, \tilde{n}(-\vec{\xi})\, \frac{2}{3} \vec{\xi}^{\,2}\, \hat{u}(\vec{r}', 2\vec{\xi})
\tag{4.32}
$$

gegeben ist. Hier bedeutet $\tilde{n}(\vec{\xi})$ die Kernmaterie-Dichtematrix.

Mit Hilfe von (4.7), (4.8) und (4.9) ergibt sich

$$\lambda_a = \frac{1}{16}\, n_c\, k_c^{-1}\, \frac{\partial V(k)}{\partial k}\Big|_{k=k_c} , \tag{4.33}$$

und mit dem speziellen Ausdruck (4.13)

$$\lambda_a = \left(\frac{k_c}{2\pi}\right)^4 \sum_{i=1}^{2} V_i\, A_4(a; k_c) . \tag{4.34}$$

Die Funktion

$$A_4(y_0) = A_3(y_0) + 6\,(2y_0)^{-2}\left(\frac{\sin(2y_0)}{2y_0} - 1\right) \tag{4.35}$$

ist überall analytisch, und es ist $\lim_{y_0 \to 0} [\, y_0^{-2} A_4(y_0)] = -\frac{1}{15}$.

Zur Auswertung des zweiten Beitrags

$$\lambda_b = \lim_{L\to\infty} \frac{1}{8} \int_{-L}^{\infty} dz \int d\vec{\xi}^{\,3} \int d\vec{r}_\perp'^{\,2}\, \vec{r}_\perp'^{\,2}\, dz'\; n(z, -\vec{\xi}) \cdot n(z-z', \vec{\xi})\, \frac{\partial}{\partial z'}\, \hat{u}(z'\vec{e}_z - \vec{r}_\perp', 2\vec{\xi}) \tag{4.36}$$

kommt man, wenn man nach Vertauschung der z und z' Integrationen die Substitution $z = \frac{1}{2} z' + z''$ macht

$$\lambda_b = \lim_{L\to\infty} \frac{1}{8} \int d\vec{\xi}^{\,3} \int d\vec{r}'^{\,2} \vec{r}_\perp'^{\,2} \int dz' \left[\frac{\partial}{\partial z'}\, \hat{u}(z'\vec{e}_z - \vec{r}_\perp', 2\vec{\xi})\right] \cdot \int_{-L-\frac{1}{2}z'}^{\infty} dz''\; \tilde{n}(z'' + \tfrac{1}{2}z', \vec{\xi})\, \tilde{n}(z'' - \tfrac{1}{2}z', \vec{\xi}) . \tag{4.37}$$

Die z' -Integration ist nur über einen endlichen Bereich auszuführen, der durch die Reichweite der Kernkräfte gegeben ist. In (4.37) haben wir benutzt, daß die Dichtematrix eine gerade Funktion ihrer Relativkoordinate $\vec{\xi}$ ist. Wenn $\hat{u}(z'\vec{e}_z - \vec{r}_\perp', 2\vec{\xi})$ wie bei unserem Ansatz (4.2) eine gerade Funktion von z' ist (bei festgehaltenen $\vec{r}_\perp'$, $\vec{\xi}$), so ist die erste Ableitung ungerade. Vom

Rest des z - Integranden trägt daher nur der ungerade Anteil zum Integral bei. Dies bewirkt bei hinreichend großer Wahl von L, daß die $\int dz''$ Integration nur noch über einen beschränkten Bereich im Kerninnern auszuführen ist, wo die Dichtematrix allein von ihrer Realtivkoordinate $\vec{\xi}$ abhängt

$$\begin{aligned} &\lim_{L\to\infty} \tfrac{1}{2} \left\{ \int_{-L-\frac{1}{2}z'}^{\infty} dz'' - \int_{-L+\frac{1}{2}z'}^{\infty} dz'' \right\} \tilde{n}(z''+\tfrac{1}{2}z', \vec{\xi})\, \tilde{n}(z''-\tfrac{1}{2}z', \vec{\xi}) \\ &= \lim_{L\to\infty} \tfrac{1}{2} \int_{-L-\frac{1}{2}z'}^{-L+\frac{1}{2}z'} dz''\, \tilde{n}(z''+\tfrac{1}{2}z', \vec{\xi})\, \tilde{n}(z''-\tfrac{1}{2}z', \vec{\xi}) \\ &= \tfrac{1}{2} z' \tilde{n}(\vec{\xi})^2 \quad . \end{aligned} \tag{4.38}$$

Hier bedeutet $\tilde{n}(\vec{\xi})$ die Kernmaterie-Dichtematrix. Das Ergebnis ist

$$\lambda_b = -\tfrac{1}{16} \int d\vec{\xi}^{\,3} \int d\vec{r}^{\,\prime 3} r_\perp'^2\, \hat{u}(r', 2\vec{\xi})\, \tilde{n}(\vec{\xi})^2 \quad . \tag{4.39}$$

Indem man beachtet, daß das Integral eine zu η_{opot} ähnliche Struktur aufweist, findet man leicht (vgl. (4.15))

$$\begin{aligned} \lambda_b = &-\tfrac{1}{16} \cdot \tfrac{2}{5} n_c^2 \tfrac{3}{4} \left\{ \sum_{i=1}^{2} V_i a_i^2 A_2(a_i k_c) \right. \\ &\left. + \sum_{i=1}^{2} W_i a_i^2 \left[A_2(a_i k_c) - 1 \right] \right\} \quad . \end{aligned} \tag{4.40}$$

Dieses Resultat läßt sich in einer (4.34) entsprechenden Weise darstellen als

$$\lambda_b = \left(\frac{k_c}{2\pi}\right)^4 \left\{ \sum_{i=1}^{2} V_i A_5(a_i k_c) + \sum_{i=1}^{2} W_i A_6(a_i k_c) \right\} \tag{4.40a}$$

mit den Funktionen

$$\begin{aligned} A_5(y_0) &= -\tfrac{2}{15} y_0^2 A_2(y_0) \quad , \\ A_6(y_0) &= -\tfrac{2}{15} y_0^2 \left[A_2(y_0) - 1 \right] \quad . \end{aligned} \tag{4.41}$$

Das z -Integral über den dritten Term in (3.19), der ja bei unserem speziellen Ansatz (4.2) verschwindet, müßte bei einer anderen Wahl der effektiven Wechselwirkung numerisch ausgewertet werden. Hierzu würde man dieselben Verfahren anwenden, die auch zur Berechnung der Oberflächenspannung σ_0 in (3.31) oder des restlichen Beitrags zur Krümmungsspannung λ_c in (3.40) nützlich sind und die wir teilweise im folgenden Abschnitt besprechen werden.

d) Entwicklung der Energie-und Teilchendichte im Kerninnern nach sphärischen Besselfunktionen.

Zur Berechnung der Oberflächenspannung σ_0 und Krümmungsspannung λ_c sind Energiedichte $\eta(z)$ und Teilchendichte $n(z)$ auszurechnen und über Ausdrücke der Gestalt $\eta(z) - (\eta_0/n_0)\, n(z)$ zu integrieren. Zur besseren Auswertung dieser für $z \to -\infty$ langsam konvergierenden Integrale wollen wir das Verhalten der Dichten beim Übergang von der Oberflächenzone ins Kerninnere studieren. Wir betrachten den Bereich, in dem der Beitrag der diskreten Wellenfunktionen $\psi_\alpha(z)$ zur Dichtematrix (2.13) schon exponentiell weggedämpft ist und die kontinuierlichen Wellenfunktionen $\psi(k_z, z)$ bereits entsprechend (2.10) reine Sinusfunktionen sind. Dort hat die Dichtematrix die Gestalt

$$\tilde{n}(\vec{r}, \vec{\xi}) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^3 \varrho \int d\vec{k}^3\, \theta(k_0^2 - \vec{k}^2)\, e^{i \vec{k}_\perp \vec{\xi}}\, \sin(-k_z z' + \vartheta_k) \cdot$$

(4.42)
$$\sin(-k_z z'' + \vartheta_k) \quad ,$$

$$z' = z + \tfrac{1}{2}\zeta \quad , \quad z'' = z - \tfrac{1}{2}\zeta \quad , \quad \zeta = \vec{e}_z \cdot \vec{\xi} \quad .$$

Die Phase ϑ_k ist eine Funktion von k_z und $k_\varrho = |\vec{k}_\perp|$. Sie ist ungerade in Abhängigkeit von k_z . Das Produkt der beiden oben auftretenden Sinusfunktionen läßt sich durch die Kosinusfunktionen von Summe und Differenz der Argumente ausdrücken. Der Beitrag mit der Differenz der Argumente ergibt gerade die Kernmaterie-Dichtematrix $\tilde{n}(\vec{\xi})$

$$(4.43)\quad \tilde{n}(\vec{r},\vec{\xi}) = \tilde{n}(\vec{\xi}) - \frac{4}{(2\pi)^3}\int d\vec{k}^3\,\theta(k_0^2-\vec{k}^2)\,e^{i\vec{k}_\perp\vec{\xi}_\perp}\cos(-2k_z z+2\vartheta_{\vec{k}}) .$$

Schreiben wir dies in der Form

$$(4.44)\quad \tilde{n}(\vec{r},\vec{\xi}) = \tilde{n}(\vec{\xi}) - \frac{4}{(2\pi)^2}\int_{-k_0}^{+k_0} dk_z\, e^{-i2k_z z}\int d\vec{k}_\perp^{\,2}\,\theta(k_0^2-k_z^2-\vec{k}_\perp^{\,2})\,e^{i\vec{k}_\perp\vec{\xi}_\perp+2i\vartheta_{\vec{k}}} ,$$

so ist wegen der Gültigkeit[46] von (P_n bezeichne das n-te Legendre-Polynom)

$$(4.45)\quad \int_{-k_0}^{+k_0} dk_z\, e^{-i2k_z z}P_n\left(\frac{k_z}{k_0}\right) = 2(-i)^n k_0\, j_n(2k_0 z)$$

eine Entwicklung der Dichtematrix und der benötigten Dichten nach sphärischen Besselfunktionen j_n naheliegend.

Wir finden für die Teilchendichte

$$(4.46)\quad n(\vec{r}) - n_0 = \sum_{n=0}^{\infty} \varrho_n\, j_n(2k_0 z) ,$$
$$\varrho_n = -(2n+1)(-i)^n\frac{4}{(2\pi)^3}\int d\vec{k}^3\,\theta(k_0^2-\vec{k}^2)\,P_n\left(\frac{k_z}{k_0}\right)e^{2i\vartheta_{\vec{k}}} ,$$

für die Dichte der kinetischen Energie

$$(4.47)\quad \eta_{kin}(\vec{r}) - \eta_{0kin} = \sum_{n=0}^{\infty} t_n\, j_n(2k_0 z) ,$$
$$t_n = -(2n+1)(-i)^n\frac{4}{(2\pi)^3}\int d\vec{k}^3\,\theta(k_0^2-\vec{k}^2)\,P_n\left(\frac{k_z}{k_0}\right)\frac{\hbar^2}{2m}\vec{k}^2\,e^{2i\vartheta_{\vec{k}}}$$

und schließlich für die Dichte der potentiellen Energie

$$\eta_{pot}(\vec{r}) - \eta_{0pot} = \sum_{n=0}^{\infty} v_n\, j_n(2k_0 z)$$
$$+ \sum_{n,m=0}^{\infty} v_{n,m}\, j_n(2k_0 z)\, j_m(2k_0 z) ,$$

(4.48)
$$v_n = (2n+1)(-i)^n \left(\frac{4}{2\pi}\right)^3 \int d\vec{k}^3\, \theta(k_0^2 - \vec{k}^2)\, P_n\left(\frac{k_z}{k_0}\right) e^{2i\vartheta_0} \cdot \frac{1}{2} \int d\vec{r}^3 d\vec{\xi}^3\, \hat{u}(\vec{r}, 2\vec{\xi})\, (-1)\, \tilde{n}(\vec{\xi})\, [1 + \cos(2k_z z)] ,$$

$$v_{n,m} = (2n+1)(-i)^n (2m+1)(-i)^m \left[\frac{4}{(2\pi)^3}\right]^2 \int d\vec{k}'^3\, \theta(k_0^2 - \vec{k}'^2)\, P_n\left(\frac{k_z'}{k_0}\right) \cdot e^{2i\vartheta_k'} \int d\vec{k}''^3\, \theta(k_0^2 - \vec{k}''^2)\, P_m\left(\frac{k_z''}{k_0}\right) e^{2i\vartheta_k''} \cdot \frac{1}{2} \int d\vec{r}^3 d\vec{\xi}^3$$
$$\hat{u}(\vec{r}, 2\vec{\xi}) \cos(2k_z'' z)\, e^{i(\vec{k}_\perp' + \vec{k}_\perp'')\vec{\xi}_\perp} .$$

Für die sphärischen Besselfunktionen $j_n(x)$ gibt es mit $\sin(x)$ und $\cos(x)$ als Faktoren versehene abbrechende Entwicklungen nach x^{-1}. Entsprechend sieht man an der Formel (4.44), daß es für die in Frage stehenden Dichten semikonvergente Entwicklungen nach $x^{-1} = (2k_0 z)^{-1}$ gibt. Für den ersten Term haben wir $j_n(x) \approx x^{-1} \sin(x - n\frac{\pi}{2}) + \ldots$ einzusetzen, dieser kann auch (aus der Integraldarstellung (4.45) ablesbar) als

(4.49)
$$j_n(x) \approx \hat{j}_n(x) + \ldots ,$$
$$\hat{j}_n(x) = x^{-1} \frac{1}{2} i^{n+1} \left[e^{-ix\zeta} P_n(\zeta)\right]_{\zeta=-1}^{\zeta=+1}$$

geschrieben werden. Wir interessieren uns für die Größen

(4.50)
$$\hat{f}(x) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n \hat{j}_n(x) , \quad x = 2k_0 z ,$$

die, mit g_n, t_n, v_n und $v_{n,m}$ für f_n eingesetzt, gerade das jeweils erste Glied der semikonvergenten Entwicklungen für (4.46), (4.47) und (4.48) angeben. Für die Teilchendichte (4.46) mit $f_n = g_n$ wird

$$(4.51) \qquad n(\vec{r}) - n_0 \approx \sum_{n=0}^{\infty} \varrho_n \hat{j}_n(x) + \dots \quad , \quad x = 2k_0 z \; .$$

Die Reihe

$$(4.52) \qquad \begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} \varrho_n \hat{j}_n(x) \;=\; & x^{-1} \, i \, \frac{4}{(2\pi)^3} \int_{-k_0}^{+k_0} dk_z \Big[e^{-ixs} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2n+1}{2} P_n(s) P_n\Big(\frac{k_z}{k_0}\Big) \Big]_{s=-1}^{s=+1} \\ & \cdot \int d\vec{k}_\perp^{\,2} \, \theta(k_0^2 - k_z^2 - \vec{k}_\perp^{\,2}) \, e^{2i\vartheta_z} \end{aligned}$$

läßt sich wegen der Vollständigkeit der Legendre-Polynome auch als

$$(4.53) \qquad \begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} \varrho_n \hat{j}_n(x) \;=\; & x^{-1} \, i \, \frac{4}{(2\pi)^3} k_0 \Big\{ \Big[e^{-ix} \textstyle\int d\vec{k}_\perp^{\,2} \, \theta(k_0^2 - k_z^2 - \vec{k}_\perp^{\,2}) \, e^{2i\vartheta_z} \Big]_{k_z = k_0} \\ & - e^{ix} \textstyle\int d\vec{k}_\perp^{\,2} \, \theta(k_0^2 - k_z^2 - \vec{k}_\perp^{\,2}) \, e^{2i\vartheta_z} \Big]_{k_z = -k_0} \Big\} \end{aligned}$$

schreiben. Weil das Integral $\int d\vec{k}_\perp^{\,2} \, \theta(-\vec{k}_\perp^{\,2})$ verschwindet, ergibt sich einfach

$$(4.54) \qquad \sum_{n=0}^{\infty} \varrho_n \hat{j}_n(x) \;=\; \sigma \quad ,$$

so daß für $n(\vec{r}) - n_0$ erst Glieder mit $x^{-2} \sin x$ und $x^{-2} \cos x$ von null verschieden sind. Entsprechend findet man

$$(4.55) \qquad \begin{aligned} & \sum_{n=0}^{\infty} t_n \hat{j}_n(x) = 0 \; , \quad \sum_{n=0}^{\infty} v_n \hat{j}_n(x) = \sigma \; , \\ & \sum_{n=0}^{\infty} v_{n,m} \hat{j}_n(x) = 0 \; , \quad \sum_{m=0}^{\infty} v_{n,m} \hat{j}_m(x) = 0 \; . \end{aligned}$$

Für den in den sphärischen Besselfunktionen j_n bilinearen Anteil von $\eta_{pot}(\vec{r}) - \eta_{0\,pot}$ sind erst Glieder der Ordnung x^{-4} von null verschieden. Dieses Verhalten der Dichten hätte man natürlich auch schon aus der Darstellung (4.44) für die Dichtematrix ablesen können. Für spätere Zwecke sind jedoch die expliziten Beziehungen (4.54) und (4.55) nützlich.

Sind die Phasen $\vartheta_k = \vartheta(|\vec{k}_\perp|, k_z)$ bekannt, so können die Koeffizienten g_n und t_n leicht (numerisch) ausgewertet werden. Die Koeffizienten v_n und $v_{n,m}$ in (4.48) hängen linear von der Wechselwirkung $\hat{u}$ ab, die durch eine Summe von Termen der Gestalt

$$\hat{u}^s(\vec{r}, z\vec{\xi}) = u^s a^{-3} b^{-3} (3/4\pi)^2 \theta(1-\tfrac{\vec{r}^2}{a^2}) \theta(1-\tfrac{\vec{\xi}^2}{b^2}) \tag{4.56}$$

gebildet wird. Die v_n und $v_{n,m}$ können daher als Summe über Teilgrößen v_n^s und $v_{n,m}^s$ ausgewertet werden

$$\begin{aligned} v_n^s &\doteq u^s (2n+1)(-i)^n \tfrac{4}{(2\pi)^3} \int d\vec{k}^3\, \theta(k_0^2 - \vec{k}^2)\, P_n(\tfrac{k_z}{k_0})\, e^{2i\vartheta_k} \cdot \\ &\quad \cdot \tfrac{1}{2}\, (-n_0)\, F_1(b k_0)\, [1 + F_2(2a k_z)] \quad , \\ v_{n,m}^s &= u^s (2n+1)(2m+1)(-i)^{n+m} \left[\tfrac{4}{(2\pi)^3}\right]^2 \int d\vec{k}'^3\, \theta(k_0^2 - \vec{k}'^2) \cdot \\ &\quad \cdot P_n(\tfrac{k_z'}{k_0})\, e^{2i\vartheta_k'} \int d\vec{k}''^3\, \theta(k_0^2 - \vec{k}''^2)\, P_m(\tfrac{k_z''}{k_0})\, e^{2i\vartheta_k''} \cdot \\ &\quad \cdot \tfrac{1}{2}\, F_2(2a k_z'')\, F_3(b k_z', b k_z'') \end{aligned} \tag{4.57}$$

Wir haben $k_z = |\vec{k}_\perp|$ gesetzt. Die Funktionen F_1, F_2, F_3 sind durch

$$\begin{aligned} &\text{a)} \quad F_1(y) = 9 y^{-3} [\, Si(y) - \sin y \,] \quad , \\ &\text{b)} \quad F_2(y) = \tfrac{3}{y} j_1(y) \quad , \\ &\text{c)} \quad F_3(y', y'') = \tfrac{1}{\pi} \int_0^\pi d\varphi\, F_2([\, y'^2 + y''^2 - 2y'y'' \cos\varphi \,]^{1/2}) \end{aligned} \tag{4.58}$$

gegeben. Sie sind auf $F_1(0) = F_2(0) = F_3(0,0) = 1$ normiert. Da sich die Funktion F_3 unter Verwendung von (Gleichung 10.1.45 in Ref. 46), p.440)

$$\begin{aligned} \frac{\sin R}{R} &= \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1)\, j_n(y')\, j_n(y'')\, P_n(\zeta) \quad , \\ R &= [\, y'^2 + y''^2 - 2y'y''\zeta \,]^{1/2} \end{aligned} \tag{4.59}$$

und der Beziehung

$$j_1(x) = -\frac{d}{dx}\frac{\sin x}{x} \tag{4.60}$$

nach partieller Integration in (4.58c) auf folgende Weise als Reihe darstellen läßt

$$F_3(y',y'') = \sum_{m=0}^{\infty} c_m \frac{3}{y'} j_{2m+1}(y') \frac{3}{y''} j_{2m+1}(y''),$$

$$c_m = \frac{4m+3}{3\pi}\int_{-1}^{+1}\frac{d\zeta}{\sqrt{1-\zeta^2}}\frac{d}{d\zeta}P_{2m+1}(\zeta) = \frac{1}{3\,16^m}\left[\frac{(2m)!}{(m!)^2}\right]^2\left[4\left(\frac{2m+1}{m+1}\right)^2 - 1\right], \tag{4.61}$$

kann man die $v^5_{n,m}$ als Summe von wenigen Termen auswerten, bei denen die $\int d\vec{k}'^3$- und $\int d\vec{k}''^3$ -Integrationen entkoppelt sind.

Die Bestimmung der sphärischen Besselfunktionen $j_n(x)$ geschieht am besten durch stabile Rekursion nach absteigendem Index[46]. Zur Auswertung von Integralen über die Dichten (4.46) bis (4.48) gelangt man durch rekursive Berechnung der Integrale über die einzelnen Besselfunktionen $j_n(x)$ bzw. ihrer Produkte $j_n(x)\,j_m(x)$. Die Rekursionsformeln haben wir im Anhang zusammengestellt.

5) Beispiel: Lokales Potential ohne Austauschterm.

Preston[40] gibt in seinem Lehrbuch eine vereinfachte, elementar herleitbare Formel für die Energie eines A-Teilchen Kernes an

$$(5.1) \qquad E = -c\cdot\left(\frac{r_0}{R}\right)^3\left[1-\frac{9}{16}\,\frac{r_0}{R}+\frac{1}{32}\left(\frac{r_0}{R}\right)^3\right]\cdot A^2 \,.$$

Hier ist nur die potentielle Energie des Kerns berücksichtigt. Die Zweiteilchenwechselwirkung wird als lokales Kastenpotential der Reichweite r_0 angesetzt. Die Nukleonendichte wird stufenförmig gewählt

$$(5.2) \qquad n(r) = n_c\,\theta(R-r) \,.$$

Die ersten beiden Terme in der eckigen Klammer von (5.1) sind als Volumenenergie und Oberflächenenergie zu deuten. Da kein Term mit $(r_0/R)^2$ auftritt, bedeutet dies eine verschwindende Krümmungsenergie.

Wir wollen versuchen, dieses Ergebnis mit unserem Formalismus zu reproduzieren. Zu diesem Zweck haben wir in allen Formeln für das in (3.11) erscheinende Potential

$$(5.3) \qquad \hat{u}(\vec{r},2\vec{\xi}) = u(|\vec{r}|)\,\delta(\vec{\xi})$$

zu setzen. Die allein interessierende Dichte der potentiellen Energie ergibt sich zu

$$(5.4) \qquad \eta(\vec{r}) = \tfrac{1}{2}\,n(\vec{r})\int d\vec{r}'^{\,3} n(\vec{r}')\,u(|\vec{r}-\vec{r}'|) \,,$$

und im Kerninnern wird die Energie pro Teilchen

$$(5.5) \qquad \eta_c/n_c = \tfrac{1}{2}\,n_c\int d\vec{r}'^{\,3}\,u(|\vec{r}-\vec{r}'|) \,.$$

Für die zur Berechnung von Oberflächenspannung σ_c und Krümmungs-

spannung λ_c wichtige Energie-Teilchendichte-Differenz folgt

$$(5.6)\qquad \eta(z) - \frac{\eta_c}{n_c} n(z) = \frac{1}{2} n(z) \int dz' [n(z') - n_c] \int d\vec{r}_\perp'^2 \, u\left(\sqrt{\vec{r}_\perp^2 + (z-z')^2}\right) .$$

Wenden wir uns zunächst der Krümmungsspannung λ_c zu. In

$$(5.7)\qquad \lambda_c = \int dz \left\{ (z - z_c)[\eta(z) - (\eta_c/n_c) n(z)] + \bar{\eta}_1(z) \right\}$$

ist das Integral über $\bar{\eta}_1$ nach (4.31) zu berechnen. Wegen des $\delta(\vec{r})$ – Anteils von $\hat{u}$ verschwindet λ_a in (4.32), und wir haben nur λ_b nach (4.39) zu berücksichtigen:

$$(5.8)\qquad \int dz \, \bar{\eta}_1(z) = -\frac{1}{16} n_c^2 \int d\vec{r}'^3 \vec{r}_\perp'^2 \, u(|\vec{r}'|) .$$

Zur Berechnung des restlichen Integrales in (5.7) nehmen wir für die z -Skala

$$(5.9)\qquad z_c = 0 \;, \quad \int dz \, [n(z) - n_c \, \theta(-z)] = 0$$

an. In die Formel

$$(5.10)\qquad \lambda_g := \int dz \, z \, [\eta(z) - (\eta_c/n_c) n(z)]$$

denken wir uns den Ausdruck (5.6) eingesetzt. Nach Ersetzen von z und z' durch $-z$ und $-z'$ in der Hälfte des Integrals ergibt sich

$$(5.11)\qquad \lambda_g = \frac{1}{4} \int dz \int dz' \, z \left\{ n(z) [n(z+z') - n_c] - n(-z) \cdot [n(-z-z') - n_c] \right\} \int d\vec{r}_\perp'^2 \, u\left(\sqrt{\vec{r}_\perp'^2 + z'^2}\right) .$$

Die geschweifte Klammer kann mit Hilfe der Größe

$$S(z) = n(z) + n(-z) - n_c \tag{5.12}$$

umgeformt werden mit dem Ergebnis

$$\begin{aligned}
\lambda_g &= \lambda_g^{(1)} + \lambda_g^{(2)} \quad , \\
\lambda_g^{(1)} &= \tfrac{1}{4} \int dz \int dz' \, z \, \left[S(z)\, n(z+z') - n(-z)\, S(z+z') \right] \cdot \\
&\quad \cdot \int d\vec{r}_\perp^{\,2} \, U\left(\sqrt{\vec{r}_\perp^{\,2} + z'^2}\right) \quad , \\
\lambda_g^{(2)} &= \tfrac{1}{4} \int dz \int dz' \, z \, n_c \left[n(z+z') - n(z) \right] \int d\vec{r}_\perp^{\,2} \, U\left(\sqrt{\vec{r}_\perp^{\,2} + z'^2}\right) .
\end{aligned} \tag{5.13}$$

Wir verfolgen zunächst den Anteil $\lambda_g^{(2)}$ weiter. Die z'-Integration in

$$\lambda_g^{(2)} = \lim_{L \to \infty} \tfrac{1}{4} n_c \int_{-L}^{\infty} dz \, z \int dz' \left[n(z+z') - n(z) \right] \int d\vec{r}_\perp^{\,2} \, U\left(\sqrt{\vec{r}_\perp^{\,2} + z'^2}\right) \tag{5.14}$$

ist wegen der endlichen Reichweite von U nur in einem beschränkten Intervall auszuführen. Vertauschen wir für endliches L die z und z' Integration und substituieren bei festgehaltenem z'

$$z'' = z + \tfrac{1}{2} z' \quad , \tag{5.15}$$

dann haben wir in

$$\begin{aligned}
\lambda_g^{(2)} &= \lim_{L \to \infty} \tfrac{1}{4} n_c \int dz' \int_{-L+\frac{1}{2}z'}^{\infty} dz'' \, z'' \left[n\left(z'' + \tfrac{1}{2} z'\right) - n\left(z'' - \tfrac{1}{2} z'\right) \right] \cdot \\
&\quad \cdot \int d\vec{r}_\perp^{\,2} \, U\left(\sqrt{\vec{r}_\perp^{\,2} + z'^2}\right) \\
&\quad - \lim_{L \to \infty} \tfrac{1}{2} n_c \int dz' \, z' \int_{-L+\frac{1}{2}z'}^{\infty} dz'' \left[n\left(z'' + \tfrac{1}{2} z'\right) - n\left(z'' - \tfrac{1}{2} z'\right) \right] \cdot \\
&\quad \cdot \int d\vec{r}_\perp^{\,2} \, U\left(\sqrt{\vec{r}_\perp^{\,2} + z'^2}\right)
\end{aligned} \tag{5.16}$$

für den Integranden des ersten Terms nur dessen in z' geraden Anteil zu nehmen. Dieser ergibt den Beitrag

$$\lim_{L\to\infty} \tfrac{1}{4}\, n_c \int dz' \int_{-L+\frac{1}{2}z'}^{-L-\frac{1}{2}z'} dz''\, z'' \left[n(z''+\tfrac{1}{2}z') - n(z''-\tfrac{1}{2}z')\right] \int d\vec{r}_\perp'^{\,2}\, u\left(\sqrt{\vec{r}_\perp'^{\,2}+z''^2}\right) \tag{5.17}$$

$$= 0 \quad ,$$

der verschwindet, weil sowohl $n(z''+\frac{1}{2}z')$ als auch $n(z''-\frac{1}{2}z')$ für $z''\to -\infty$ (schnell genug) gegen n_c konvergieren, ihre Differenz also null ergibt. Zur weiteren Auswertung des verbleibenden Terms beachten wir die Beziehungen

$$\int_{-L+\frac{1}{2}z'}^{\infty} dz''\, n(z''+\tfrac{1}{2}z') - \int_{-L+\frac{1}{2}z'}^{\infty} dz''\, n(z''-\tfrac{1}{2}z') \tag{5.18}$$

$$= \int_{-L+z'}^{\infty} dz\, n(z) - \int_{-L}^{\infty} dz\, n(z) = \int_{-L+z'}^{-L} dz\, n(z)$$

und

$$\lim_{L\to\infty} \int_{-L+z'}^{-L} dz\, n(z) = -z'\, n_c \quad . \tag{5.19}$$

Wir finden hiermit für $\lambda_g^{(2)}$ den Ausdruck

$$\lambda_g^{(2)} = n_c^2\, \tfrac{1}{8} \int dz'\, z'^2 \int d\vec{r}_\perp'^{\,2}\, u\left(\sqrt{\vec{r}_\perp'^{\,2}+z'^2}\right) \quad , \tag{5.20}$$

der wegen der Kugelsymmetrie von $u(|\vec{r}|)$ gerade das Negative von (5.8) ist. Das bedeutet, daß für die gesamte Krümmungsspannung λ_c nur der Beitrag von $\lambda_g^{(4)}$ übrigbleibt

$$\lambda_c = \tfrac{1}{4} \int dz \int dz'\, z \left\{ S(z)\, n(z+z') - n(-z)\, S(z+z') \right\} \cdot \tag{5.21}$$

$$\cdot \int d\vec{r}_\perp'^{\,2}\, u\left(\sqrt{\vec{r}_\perp'^{\,2}+z'^2}\right)$$

Wir haben noch nicht vom speziellen Aussehen von $u(|\vec{r}|)$ oder $n(z)$ Gebrauch gemacht. Die Dichte (5.2) lautet in der z -Skala

(5.2a) $$n(z) = n_c\,\theta(-z)\ .$$

Für diesen Verlauf ist $S(z) \equiv \sigma$ wegen $\theta(z)+\theta(-z) = 1$, also ist

(5.22) $$\lambda_c = \sigma$$

in Übereinstimmung mit dem von Preston angegebenen Ausdruck (5.1). Genauso verschwindet λ_c auch für alle anderen Dichten mit $n(z) + n(-z) = n_0$, die also im $z - n(z)$ Diagramm punktsymmetrisch bezüglich des Punktes $(\sigma\ ,\ \frac{1}{2} n_c)$ sind.

Speziell für den Dichteverlauf (5.2a) und das Zweiteilchen-Potential

(5.23) $$u(|\vec{r}|) = u_0\,\theta(r_n - |\vec{r}|)$$

wollen wir die Energie pro Teilchen η_c/n_c von Kernmaterie und die Oberflächenspannung σ_c berechnen. Wir erhalten

(5.24) $$\begin{aligned}\eta_c/n_c &= \tfrac{1}{2}\, n_c\, u_0\, \tfrac{4\pi}{3} r_n^3 \ , \\ &= \tfrac{1}{2}\, u_0\, \left(\tfrac{r_n}{R}\right)^3 A \ ,\end{aligned}$$

wobei wir $A = n_c\, \frac{4\pi}{3} R^3$ benutzt haben. Die Oberflächenspannung σ_c ist als Integral über (5.6) auszuwerten. Wir können

(5.25) $$\begin{aligned}\sigma_c = \int dz\, [\eta(z) - \tfrac{\eta_c}{n_c} n(z)] &= \tfrac{1}{2}\, u_0\, n_c^2 \int dz\, \theta(-z)\cdot \\ &\cdot \int dz'\, [\,\theta(-z')-1\,] \int d\vec{r}_\perp'^{\,2}\, \theta(r_n^2 - \vec{r}_\perp'^{\,2} - [z-z']^2)\end{aligned}$$

elementar auswerten mit dem Ergebnis

$$\sigma_c = -\tfrac{1}{8}\, n_c^2\, U_0\, \pi\, r_n^4 \qquad (5.26)$$

Die Oberflächenenergie erhält man durch Multiplikation mit dem Flächeninhalt $F = 4\pi R^2$ zu

$$\begin{aligned} \sigma_c F &= -\tfrac{1}{2}\, n_c^2\, U_0\, \pi^2\, r_n^4\, R^2 \\ &= (\eta_c/n_c)\cdot(-n_c)\,\tfrac{3}{4}\pi\,\frac{r_n}{R}\,R^3 \qquad (5.27) \\ &= -(\eta_c/n_c)\,A\cdot\tfrac{9}{16}\,\frac{r_n}{R} \,. \end{aligned}$$

Daraus folgt die Gesamtenergie

$$\begin{aligned} E &= (\eta_c/n_c)\,A + \sigma_c F + \lambda_c L + \dots \\ &= (\eta_c/n_c)\,A\left\{1 - \tfrac{9}{16}\,\frac{r_n}{R} + O\left(\left[\tfrac{r_n}{R}\right]^3\right)\right\}, \end{aligned} \qquad (5.28)$$

was mit (5.24) auch als

$$E = \tfrac{1}{2}\, U_0 \left(\frac{r_n}{R}\right)^3 \left\{1 - \tfrac{9}{16}\,\frac{r_n}{R} + O\left(\left[\tfrac{r_n}{R}\right]^3\right)\right\} A^2 \qquad (5.28a)$$

geschrieben werden kann. Diese Formel stimmt mit (5.1) überein, wenn man $c = -\tfrac{1}{2}\, U_0$ setzt.

Wir wollen fragen, ob man in Verallgemeinerung von (5.21) noch Aussagen machen kann, die nicht die spezielle Gestalt (5.3) für die effektive Wechselwirkung voraussetzen. Man könnte zunächst versuchen von der Gleichung

$$\eta_{neu}(\vec{r}) = \tfrac{1}{2} \int d\vec{\xi}^{\,3}\, \tilde{n}(\vec{r},\vec{\xi}) \int d\vec{r}^{\,\prime 3}\, \tilde{n}(\vec{r}^{\,\prime},\vec{\xi})\, \hat{U}(\vec{r}-\vec{r}^{\,\prime}, 2\vec{\xi}) \qquad (5.29)$$

zu einer (5.21) analogen Beziehung zu kommen, indem man einfach die

$\int d\vec{\xi}^{\,3}$ – Integration bei allen Gleichungen an den Anfang setzt. Dies erweist sich in der Tat überall als durchführbar mit Ausnahme der Gleichungen (5.5) und (5.6). Sie ergeben eine Zusatzkorrektur

$$
\begin{aligned}
\eta_{pot}(z) - (\eta_{c\,pot}/n_c)\, n(z) \;=\; & \tfrac{1}{2} \int d\vec{\xi}^{\,3}\, \tilde{n}(z,\vec{\xi}) \int dz' \left[\tilde{n}(z',\vec{\xi}) - \tilde{n}(\vec{\xi})\right] \cdot \\
& \cdot \int d\vec{r}_\perp'^{\,2}\, \hat{U}(\vec{r}_\perp' + (z-z')\,\vec{e}_z,\, 2\vec{\xi}) \\
& + \tfrac{1}{2} \int d\vec{\xi}^{\,3} \left[\tilde{n}(z,\vec{\xi}) - n(z)\, \frac{\tilde{n}(\vec{\xi})}{n_c}\right] \tilde{n}(\vec{\xi}) \int d\vec{r}'^{\,3}\, \hat{U}(\vec{r}',\, 2\vec{\xi}) \,.
\end{aligned}
\tag{5.30}
$$

Der erste Anteil auf der rechten Seite dieser Gleichung ist formal entsprechend zu (5.6) gebildet. Sein $\int dz$ -Integral können wir daher wieder mit dem λ_b -Beitrag von $\int dz\, \bar{\eta}_{1\,pot}(z)$ nach (4.39) zusammenfassen. Der λ_a -Beitrag wird jedoch nicht mehr zu vernachlässigen sein. Insgesamt finden wir damit für den Anteil der potentiellen Energie zur Krümmungsspannung

$$
\begin{aligned}
\lambda_{c\,pot} \;=\; & \frac{1}{16}\, n_c\, k_c^{-4}\, \frac{\partial V(k)}{\partial k}\Big|_{k=k_c} \\
& + \tfrac{1}{4} \int d\vec{\xi}^{\,3} \int dz\, dz'\, z \left\{ S(z,\vec{\xi})\, \tilde{n}(z+z',\vec{\xi}) - \tilde{n}(-z,\vec{\xi})\, S(z+z',\vec{\xi}) \right\} \cdot \\
& \cdot \int d\vec{r}_\perp'^{\,2}\, \hat{U}(\vec{r}_\perp' + z'\vec{e}_z,\, 2\vec{\xi}) \\
& + \tfrac{1}{2} \int dz\, z \int d\vec{\xi}^{\,3} \left[\tilde{n}(z,\vec{\xi}) - n(z)\, \frac{\tilde{n}(\vec{\xi})}{n_c}\right] \tilde{V}(\vec{\xi})
\end{aligned}
\tag{5.31}
$$

mit

$$
S(z,\vec{\xi}) \;=\; \tilde{n}(z,\vec{\xi}) + \tilde{n}(-z,\vec{\xi}) - \tilde{n}(\vec{\xi}) \,. \tag{5.32}
$$

Hierbei ist die z -Skala so gewählt, daß z_c verschwindet. Außerdem haben wir von der Gleichung (4.7) für das Einteilchenpotential $\tilde{V}(\vec{\xi})$ in Kernmaterie Gebrauch gemacht.

Denken wir uns nun die Wechselwirkung (4.2) in der obigen Gleichung eingesetzt. Der durch W_1 und W_2 gekennzeichnete

Anteil dieser Wechselwirkung beeinflußt das Kernmaterie-Einteilchenpotential $\tilde{V}(\vec{\xi})$ bzw. $V(k)$ nicht. Daher ergibt er nur für den mittleren der drei Summanden in (5.31) einen Beitrag.

Als weiterer Punkt ist zu bemerken, daß der Beitrag des mittleren Terms in (5.31) unbedeutend sein wird, falls die effektive Zweiteilchen-Wechselwirkung nicht allzu pathologisch ist. Der Dichteverlauf $n(z)$ ist nämlich einigermaßen punktsymmetrisch um $z = z_c$, $n = \frac{1}{2} n_c$, vgl. Abbildung 2 auf Seite 126. Nimmt man diese Eigenschaft auch für die Dichtematrix $n(z,\vec{\xi})$ an, so wird $S(z,\vec{\xi})$ in (5.32) klein sein. Als Näherung für $\lambda_{c\,pot}$ würde man daher die Summe des ersten und letzten Terms in (5.31) nehmen. Zu beachten ist, daß diese Näherung dann nicht mehr direkt von der gewählten effektiven Wechselwirkung abhängt, sondern nur noch indirekt über das Kernmaterie-Einteilchenpotential $\tilde{V}(\vec{\xi})$ oder seine Fourier - transformierte $V(k)$.

6) Die Rechnungen.

a) Vorbemerkungen.

Der Ansatz (4.2) für die effektive Wechselwirkung enthält sechs Parameter: die beiden Reichweiten a_1 und a_2 und die vier Kraftkonstanten V_1, V_2 und W_1, W_2. Bei Festhaltung aller anderen Größen hängt die Energiedichte nach (3.11) linear von den Kraftkonstanten ab. Diese Linearität überträgt sich einerseits auf viele Kernmateriegrößen, zum Beispiel auf ε_c, α_c nach (4.29) oder μ_c nach (4.24), andererseits aber auch auf die Oberflächenspannung σ_0 und die Krümmungsspannung λ_0 nach (3.31). Geben wir einige dieser Größen vor, so sind V_1, V_2 und W_1, W_2 aus linearen Gleichungen zu bestimmen.

Die Reichweiten a_1 und a_2 sind zunächst voneinander unabhängig wählbar. Wir schränken den Bereich der Möglichkeiten ein, indem wir

$$a_2 = 2a_1 \tag{6.1}$$

setzen. Dies erweist sich für das numerische Rechnen bequem, da dann die äquidistanten Integrationsstützstellen, die durch die Länge a_1 bestimmt werden, mit denen der Länge a_2 zusammenfallen.

b) Anpassung der Kraftkonstanten.

Wir geben die Kernmateriegrößen ε_c, α_c und η_c vor (numerische Werte in Tabelle 1 auf Seite 108) und berechnen zu einer festen Reichweite a_1 die Größen V_1 und V_2 nach (4.29). Wegen der linearen Abhängigkeit der Oberflächenspannung σ_0 bzw. der spezifischen Oberflächenenergie β_0 von W_1 und W_2 können wir

$$\beta_0 = W_1 \beta_{0(1)} + W_2 \beta_{0(2)} + \beta_{0(3)} \tag{6.2}$$

ansetzen. Die Koeffizienten $\beta_{o(i)}$ sind numerisch auszuwerten. Sie hängen von der Mittelpunktsdichte n_o bzw. dem entsprechenden Fermiimpuls k_o ab, außerdem von einem Satz a_o von Parametern, die den Verlauf der Wellenfunktionen φ in der Oberfläche charakterisieren, vgl. Gleichung (3.36). Wir schränken auch hier ein: Wir berücksichtigen als einzigen Parameter eine Länge a_o, die proportional zur Dicke der Oberflächenzone ist, in welcher das Einteilchenpotential in (2.17) von seinem Kernmateriewert auf null abfällt. Zu jedem Wert der Länge a_o gehört eine Dicke t_o des Dichteabfalls in der Oberfläche. Wir fordern, daß β_o bezüglich Variation von a_o für ein $a_o = a_c$ minimal ist, für das die Oberflächendicke t_o einen bestimmten, etwa aus Elektronen-Streuexperimenten gewonnenen Wert t_c annimmt. Außerdem soll β_o an dieser Stelle gleich einem Wert $\beta_{c\,exp}$ sein (numerische Werte in Tabelle 1), den wir uns durch Anpassen einer Massenformel (0.2) an experimentelle Kernmassen bestimmt denken. Dies führt zu den Gleichungen

$$(6.3)\qquad \begin{aligned} \sigma &= W_1 \frac{\partial \beta_{o(1)}}{\partial a_o} + W_2 \frac{\partial \beta_{o(2)}}{\partial a_o} + \frac{\partial \beta_{o(3)}}{\partial a_o} \,, \\ \beta_{c\,exp} &= W_1 \beta_{o(1)} + W_2 \beta_{o(2)} + \beta_{o(3)} \,, \end{aligned} \qquad a_o = a_c \,,\ k_o = k_c \,,$$

aus denen W_1 und W_2 berechnet werden können. Damit sind zu vorgegebener Reichweite a_1 alle Kraftkonstanten bestimmt. Die Rechnungen werden für mehrere Werte von a_1 durchgeführt, diese entsprechen nach (4.24) verschiedenen Kompressibilitäten μ_c.

Analog zu den Gleichungen (6.2) und (6.3) kann man auch die Ableitung $\nu_k = \partial\beta_o/\partial k_o$ der spezifischen Oberflächenenergie β_o nach dem Fermiimpuls k_o und die Krümmungsspannung λ_c bzw. die spezifische Krümmungsenergie γ_c darstellen:

$$(6.4)\qquad \begin{aligned} \nu_k &= W_1 \nu_{k(1)} + W_2 \nu_{k(2)} + \nu_{k(3)} \,, \\ \nu_{k(i)} &= \frac{\partial \beta_{o(i)}}{\partial k_o} \,, \quad k_o = k_c \,,\ a_o = a_c \,, \quad i = 1, 2, 3 \,, \end{aligned}$$

$$(6.5)\qquad \gamma_c = W_1 \gamma_{c(1)} + W_2 \gamma_{c(2)} + \gamma_{c(3)} \,.$$

Zweckmäßigerweise wird man die Kraftkonstanten w_1 und w_2 zunächst offen lassen und nur die entsprechenden Koeffizienten $\beta_{c(\omega)}$, $\gamma_{c(\omega)}$ usw. auswerten. Dann erst werden w_1 und w_2 nach (6.3) bestimmt und die übrigen Größen ν_k, γ_c berechnet. Da nach (6.3) die Kraftkonstanten nun umgekehrt auch linear von vorgegebenen $\beta_{c\,exp}$ abhängen und sich diese Linearität auf ν_k und γ_c nach (6.4), (6.5) überträgt, schreiben wir

$$\nu_k = \nu_k^{(0)} + \beta_{c\,exp}\,\nu_k^{(1)} \,, \tag{6.6}$$

$$\gamma_c = \gamma_c^{(0)} + \beta_{c\,exp}\,\gamma_c^{(1)} \tag{6.7}$$

und brauchen uns damit noch nicht einmal auf einen bestimmten Wert $\beta_{c\,exp}$ für die spezifische Oberflächenenergie festlegen. Die Ableitungen nach a_0 und k_0 werden in der numerischen Rechnung durch einen Differenzenquotienten ersetzt. Wir haben eine 5-Punkt-Formel angewandt (vgl. Ref. 46), Tabelle 25.2, p. 914).

c) Zum Einteilchenpotential.

Die Wellenfunktionen φ, aus denen die Dichtematrix aufgebaut wird, genügen einer Gleichung mit nichtlokalem Potential

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\hbar^2}{2m}k_\varrho^2\right)\varphi(z) + \int dz'\, V(k_\varrho; z, z')\,\varphi(z') = \varepsilon\,\varphi(z) \,, \quad k_\varrho = |\vec{k}_\perp| \,. \tag{6.8}$$

Im Kerninnern ist

$$V(k_\varrho; z, z') = \frac{1}{2\pi}\int dk_z\, V\!\left(\sqrt{k_\varrho^2 + k_z^2}\right) e^{ik_z(z-z')} \,, \quad \frac{z+z'}{2} \to -\infty \,, \tag{6.9}$$

zu nehmen, wobei die Fouriertransformierte $V(k)$ durch (4.12) gegeben ist. Als einfaches, nur von einer Länge a_0 abhängendes Potential würde man gerne in Verallgemeinerung von (6.9) auf den Oberflächenbereich den Separationsansatz

$$V(k_\varrho; z, z') = U\left(\tfrac{z+z'}{2}\right) \tfrac{1}{2\pi} \int dk_z \, V(\sqrt{k_\varrho^2 + k_z^2}) \, e^{i k_z (z - z')} ,$$

$$U(z) = (1 + e^{z/a_0})^{-1} \qquad (6.10)$$

machen. Da aber bei der numerischen Rechnung die Wellenfunktionen sehr oft gebraucht werden, haben wir eine grobe Vereinfachung von (6.10) gewählt

$$V(k_\varrho; z, z') = U\left(\tfrac{z+z'}{2}\right) V(\sqrt{k_\varrho^2 + k_z^2}) \, \delta(z - z') ,$$

$$U(z) = (1 + e^{z/a_0})^{-1} \qquad (6.11)$$

Hier ist für k_z der Wert einzusetzen, der das asymptotische Sinus-Verhalten von $\psi(k_\varrho, k_z; z)$ nach (2.10) beschreibt. Die Gleichung (6.8) hat (wegen der Monotonie von $U(z)$) keine diskreten ε_ν als Lösungen. Sie kann durch Auswertung einer Hypergeometrischen Reihe gelöst werden (Anhang A 2). Allerdings gehen durch diese zu grobe Näherung die Orthonormierungseigenschaften (2.15) verloren (vgl. Anhang A 3). Es ist zu vermuten, daß dies trotzdem auf die Ergebnisse keinen großen Einfluß hat, da das Variationsminimum ja auch stationär ist gegen Variationen der Wellenfunktionen, die nur die Normierung erhalten. Das hatten wir uns in Kapitel 1a auf Seite 10 überlegt.

d) Numerische Verfahren.

Die numerische Auswertung der im obigen Abschnitt b definierten Größen $\beta_{\alpha(\alpha)}$ usw. erfolgte teils durch direkte Berechnung der Energiedichte in (3.11), teils nach den in Kapitel 4d beschriebenen Methoden. Die z -Achse wurde in der Oberflächenzone in einem Bereich $z_1 \le z \le z_k$ in äquidistante Stützstellen z_i unterteilt. Die Dichtematrix $n(z; \zeta, \varrho)$ wurde an diesen Stellen tabelliert mit gewissen Werten ζ_κ , ϱ_κ der Relativkoordinaten ($\zeta = \vec{e}_z \vec{\xi}$, $\varrho = |\vec{\xi}_\perp|$) als Stützstellen für die $\int d\vec{\xi}^3$ - Integration

in (3.11). z_t wurde so groß gewählt, daß kein merklicher Beitrag mehr zur jeweiligen $\int dz$ - Integration zu erwarten war. Für den Bereich $z \leq z_t + a_z$ wurden die Entwicklungen nach sphärischen Besselfunktionen in 4d zu Hilfe genommen. Wir wählten $z_t \lesssim -13\,f$ und $z_t \approx 5\,f$. Die Dichtematrix ist durch (2.13) gegeben (ohne diskrete Wellenfunktionen χ_ν, vgl.6c). Beachtet man, daß die Besselfunktion $J_0(x)$ durch

$$J_0(x) = \frac{1}{\pi}\int_0^\pi d\varphi\, e^{ix\cos\varphi} \tag{6.12}$$

definiert werden kann, so wird man statt (2.13) die einfachere Formel

$$\rho(\vec{r}',\vec{r}'') = \frac{g}{(2\pi)^2}\int_0^{k_0} dk\, k \int_{-k}^{+k} dk_z\, J_0(k_\varrho\,|\vec{\xi}_\perp|)\cdot \tag{6.13}$$
$$\cdot\, \chi(|\vec{k}_\perp|,k_z,z')\,\chi(|\vec{k}_\perp|,k_z,z'') \quad , \quad |\vec{k}_\perp| = k_\varrho = \sqrt{k^2-k_z^2}\,,$$

anwenden.

Die Werte der bei den Rechnungen benutzten physikalischen Eingangsgrößen sind in Tabelle 1 zusammengestellt. Für die Kastenreichweite a_r (dann ist $a_\perp = 2a_r$) haben wir die Werte 0.7 (0.1) 1.3 f und 2.1, 2.2 f gewählt. Zu jeder Kastenreichweite a_r wurde diejenige Dicke a_c des Einteilchen-Potentialabfalls bestimmt, für die sich die in Tabelle 1 angegebene Dicke t_c des Dichteabfalls einstellt, diese a_c - Werte sind in Tabelle 2 zusammengefaßt. (Daß man nicht immer dasselbe a_c bekommt, liegt daran, daß die Geschwindigkeitsabhängigkeit des Einteilchenpotentials von der effektiven Wechselwirkung abhängt.) Außerdem sind dort noch die Werte z_c eingetragen, die die Lage der Kernoberfläche charakterisieren. Als Schrittweite bei der Ersetzung von Ableitungen durch Differenzenformeln wählten wir stets $\Delta a_0 = 0.05\,f$ für die Differentiation nach a_0 und $\Delta k_0 = 0.02\,f^{-1}$ für die Differentiation nach k_0.

Alle Integrationen außer den Integrationen $\int dz$ über die z-Koordinate wurden mit Gaußschen Stützstellen und Gewichten[47] ausgeführt. Es ist bemerkenswert, daß die Dichtematrix bezüglich ihrer Relativkoordinate $\vec{\xi}$ eine so glatte Funktion ist, daß bei a_1 Werten in $0.7\,f \leq a_1 \leq 1.3\,f$ zur $\int d\vec{\xi}^3 = 2\pi \int d\xi\, \xi^2 \int d(\cos\Theta)$ Integration in (3.11) für $\int d(\cos\Theta)$ nur zwei und für $\int d\xi$ nur vier Stützstellen benötigt wurden, um eine mit den $\int dz$ - Integrationen konsistente Genauigkeit zu erzielen. Außerdem wurden folgende Anzahlen N von Stützstellen gewählt, solange die Reichweite a_1 im Bereich $0.7\,f \leq a_1 \leq 1.3\,f$ variierte: Zur $\int dk$ -Integration und $\int dk_z$ - Integration in (6.13) $N_k = N_{kz} = 16$ für $z', z'' \gtrsim 6-7\,f$, $N_k = N_{kz} = 7$ für $z', z'' \lesssim 6-7\,f$; für die $\int d\vec{k}^3\,\theta(k_0^2 - \vec{k}^2) = 2\pi \int_0^{k_0} dk\, k \int_{-k}^{+k} dk_z$ - Integrale in (4.46) bis (4.48) $N_k = 8$, $N_{kz} = 16$; dabei wurden in den Reihenentwicklungen der genannten Gleichungen bis zu 32 Glieder mitgenommen. In der Reihenentwicklung (4.61) erwiesen sich 4 Terme als ausreichend. Bei den Integrationen wurde zur Verbesserung der Genauigkeit bei gleicher Stützstellenzahl wenn möglich die Geradheit des Integranden mit berücksichtigt. Für die Reichweiten $a_1 = 2.1\,f$ und $a_1 = 2.2\,f$ wurden die radialen Stützstellenzahlen der $\int d\vec{\xi}^3$ Integration in (3.11) auf 8 verdoppelt und die Zahl der noch mitgenommenen Terme in (4.61) auf 7 erhöht. Zur Ausführung der $\int dz'$ und $\int dz$ -Integrationen in (3.11) und (3.31a), (3.32a) wurden für die Abstände der äquidistanten Stützstellen stets etwa $\Delta z = 0.13\,f$ gewählt. Jeweils etwa $N \approx 10$ Stützstellen wurden zur Anwendung einer N -Punkte Integrationsformel zusammengefaßt. Zur bequemen Ausführung der $\int dz'$ Integration in (3.11) wurden die genannten Größen Δz und N so gewählt, daß ein ganzes Vielfaches von $N \cdot \Delta z$ gerade die Länge $2a_1$ ergibt. (Beispiel: $a_1 = 0.9\,f$, $\Delta z = 0.1287\,f$, $N = 7$, also $2a_1 = 2N \cdot \Delta z$.)

Tests ergaben für die Oberflächengrößen eine Genauigkeit von vier

Dezimalen, dagegen für die Krümmungsgrößen nur eine Genauigkeit von drei Dezimalen. Diese Größen sind bereits Integrale über Differenzen von Dichten. Die Dichten selbst haben eine Genauigkeit von etwa sechs Dezimalen. Eine weitere Verbesserung der Genauigkeit mit einer Rechenmaschine, die normalerweise mit acht Dezimalen rechnet, erscheint daher nur durch einige Vermehrung des Aufwandes (Doppelte Genauigkeit, Vergrößerung der Stützstellenzahl und damit entsprechende Erhöhung des Zeit-und Kernspeicherbedarfs) erreichbar.

7) Ergebnisse und Diskussion.

Die Rechnungen wurden zu mehreren Werten der Kasten-Reichweite a_1 durchgeführt. Die beiden Kraftkonstanten V_1 und V_2 wurden an Kernmateriedaten angepaßt, vgl. Gleichungen (4.29). Die andern beiden Kraftkonstanten W_1 und W_2 sind über das Gleichungssystem (6.3) zu berechnen, dessen Koeffizienten den numerisch gefundenen Zahlen in Tabelle 3 zu entnehmen sind. (Jeweils die ersten Zahlentripel der ersten fünf aus drei Zeilen bestehenden Zahlenblöcke ergeben die Koeffizienten und ihre Ableitungen in (6.3) mit einem 5-Punkte Differenzenquotienten.) Die so berechneten Konstanten V_1, V_2 und W_1, W_2 stehen in der Tabelle 4. Da nach dem Gleichungssystem (6.3) W_1 und W_2 linear von $\beta_{c\,exp}$ abhängen, brauchen nur die beiden Koeffizienten dieser Linearität $W_i = W_i^{(0)} + \beta_{c\,exp}\, W_i^{(1)}$ angegeben zu werden.

Die Tabelle 4 zeigt, daß die Kraftkonstanten W_1 und W_2 (Einheit MeV f^3, vgl. Gleichung (4.2)) ziemlich groß sind. Das hat zwei Gründe. Erstens haben die durch W_1 und W_2 charakterisierten Anteile der effektiven Wechselwirkung nur ein relativ geringes Gewicht, ergeben sie doch im Innern von Kernmaterie keinen Beitrag. Zweitens stellt sich heraus, daß das Gleichungssystem (6.3) schlecht konditioniert ist. Das merkt man daran, daß bei der Berechnung der Determinante dieses Gleichungssystems (Differenz aus zwei Produkten) etwa zwei Dezimalen an Genauigkeit verlorengehen.

Bei gegebenen Kraftkonstanten können nun auch die spezifische Krümmungsenergie γ_c und die Ableitung ν_k der spezifischen Oberflächenenergie nach k_0 ausgewertet werden. γ_c ist zu berechnen aus dem obersten Zahlentripel der Tabelle 3 und dem zweiten Zahlentripel des dritten Dreizeilenblocks, vgl. Gleichung (6.5). ν_k berechnet sich aus den ersten Zahlentripeln der letzten vier Dreizeilenblöcke. Dabei wird wieder der Differentialquotient in Gleichung (6.4) durch einen Differenzenquotienten ersetzt. Wie W_1 und W_2 sind auch γ_c und ν_k linear in $\beta_{c\,exp}$, die Linea-

ritätskoeffizienten sind in Tabelle 5 zu finden. In dieser Tabelle ist außerdem zu jeder Reichweite a_1 die Kompressibilität $c = \mu_c k_c^2$ eingetragen, vgl. hierzu Gleichung (4.24). Als Beispiel wollen wir einen mittleren Wert $\beta_{c\,exp} = 18.5\,MeV$ für die spezifische Oberflächenenergie annehmen. Die an diesen Wert angepaßten Kraftkonstanten W_1 und W_2 stehen zusammen mit den Werten von γ_c und ν_k in Tabelle 6. Dort sind auch die in der Energieformel (3.44) auftretende spezifische Komprimierungsenergie $\varkappa_c = \nu_k^2 / 2\mu_c$ und die gesamte spezifische $A^{1/3}$ -Energie $\tilde{\gamma}_c = \gamma_c - \varkappa_c$ für sphärische Kerngestalten $\varphi_k = 1 = \varphi_s$ angegeben.

Die Abbildungen 2 bis 7 zeigen das Verhalten verschiedener Dichten in der Kernoberfläche für $a_1 = 0.9\,f$ und $\beta_{c\,exp} = 18.5\,MeV$. Alle Dichten verschwinden außerhalb des Kernes exponentiell und nähern sich im Kerninnern mit mehr oder weniger stark ausgeprägten Schwankungen ihrem Kernmaterie-Wert. Die Schwankungen rühren von der scharfen Fermikante her. Die Integrationsgrenzen bei den $\vec{k}$ -Raum-Integralen sind durch eine $\theta(k_c^2 - \vec{k}^2)$ -Funktion gegeben, vgl. zum Beispiel Gleichung (4.44). Die ungefähre Wellenlänge λ der Schwankungen folgt aus dem asymptotischen Verhalten der sphärischen Besselfunktion in (4.46) bis (4.48). Aus der Bedingung $2 k_c \lambda = 2\pi$ und $k_c = 1.36\,f^{-1}$ ergibt sich $\lambda = 2.31\,f$. Die Teilchendichte $n(z)$ wird in Abbildung 2, die Energiedichte $\eta(z)$ in Abbildung 3 dargestellt. Offenbar zeigt die Teilchendichte einen bezüglich des Punktes $z = z_c$ $(= -1.03\,f)$, $n = \frac{1}{2} n_c$ $(= 0.085\,f^{-3})$ ziemlich punktsymmetrischen Verlauf. Demgegenüber weisen Thomas-Fermi-Rechnungen einen für $z > z_c$ rascheren Abfall auf und ergeben für $z < z_c$ eine viel langsamere Annäherung der Dichte an ihren Kernmateriewert. Auf dieses unterschiedliche Verhalten macht auch H.S. Köhler aufmerksam [21].

Die beträchtlichen Schwankungen der Energiedichte in Abbildung 3 rühren von dem durch W_1, W_2 charakterisierten Anteil der effektiven Wechselwirkung her. Dieser ergibt im Kerninnern, wo die Dichtematrix bezüglich ihrer Schwerpunktskoordinate z konstant ist,

keinen Beitrag. In der Oberflächenzone ist er empfindlich gegen z -Variationen der Dichtematrix. Er wirkt also wie ein Differentialoperator $\frac{\partial^2}{\partial z^2}$, was man formal auch daran sieht, daß seine Fouriertransformierte bezüglich $\vec{r}$ als Funktion von $\vec{k}$ für $\vec{k} = \vec{0}$ verschwindet und damit erst k^2 -Glieder aufweist.

Die bei der Berechnung von Oberflächenenergie und Krümmungsenergie auftretende Dichtekombination $\eta(z) - \frac{\eta_c}{n_c} n(z)$ zeigt Abbildung 4. Sie kann analog zu den Aufspaltungen in (6.2) bis (6.5) aufgeteilt werden

$$\eta(z) - \frac{\eta_c}{n_c} n(z) = \left[\eta(z) - \frac{\eta_c}{n_c} n(z)\right]_1 + \left[\eta(z) - \frac{\eta_c}{n_c} n(z)\right]_2 + \left[\eta(z) - \frac{\eta_c}{n_c} n(z)\right]_3 \tag{7.1}$$

in zwei Anteile (Indices 1 und 2), die die Kraftkonstanten W_1 bzw. W_2 als Faktor enthalten (Abbildungen 5 und 6), und einen Anteil, der von W_1 und W_2 unabhängig ist (Abbildung 7). Dabei sieht man, daß die Dichten $\left[\eta - \frac{\eta_c}{n_c} n\right]_1$ und $\left[\eta - \frac{\eta_c}{n_c} n\right]_2$ bis auf das verschiedene Vorzeichen ein ziemlich ähnliches Verhalten haben und jede für sich groß gegenüber der Dichte $\left[\eta - \frac{\eta_c}{n_c} n\right]_3$ ist. Dies ist wieder ein Hinweis auf die oben erwähnte schlechte Konditionierung des Gleichungssystems (6.3). Es wäre also günstiger gewesen, hier von vorneherein zwei in ihrem Verhalten sich stärker unterscheidende Wechselwirkungen zu wählen.

In Abbildung 8 ist die spezifische $A^{1/3}$ -Energie $\tilde{\gamma}_c$ (für sphärische Kerne) gegen die Kastenlänge a_1 aufgetragen, es wurde $\beta_{c\,exp} = 18.5\,MeV$ angenommen. Abbildung 9 zeigt die Abhängigkeit der Kompressibilität $c = \mu_c k_c^2$ von a_1 . Offenbar gibt es zwei Bereiche von a_1 , die einen vernünftigen Wert, etwa 150 - 200 MeV nach Ref.40)p.202, für die Kompressibilität ergeben. Abbildung 8 und Tabelle 6 zeigen, daß die spezifische $A^{1/3}$-Energie $\tilde{\gamma}_c$ bei einer Änderung der Kastenlänge a_1 und festem $\beta_{c\,exp}$

innerhalb des ziemlich großen Intervalls von $-45\,MeV$ bis $+20\,MeV$ variiert. Dagegen ist die spezifische Krümmungsenergie γ_c einigermaßen konstant, sie schwankt nur zwischen $44\,MeV$ und $37\,MeV$. Wie die Tabelle 6 zeigt, hängt der von der Kompressibilität herrührende Anteil $\varkappa_c$ an $\tilde{\gamma}_c$ stark vom Ansatz der effektiven Wechselwirkung ab. Daher ist hier die Auffassung naheliegend, daß man auf diesem Weg eher aus einer anderweitigen Bestimmung (Deformationsabhängigkeit bei der Kernspaltung[34]) der Größe $\tilde{\gamma}_c$ auf die effektive Wechselwirkung schließen sollte. Aus der Gleichung (3.44) ist ersichtlich, daß die Faktoren, mit denen γ_c und $\varkappa_c$ zu multiplizieren sind, eine verschiedene Gestaltabhängigkeit aufweisen. Man sollte also über die Gestaltabhängigkeit die Größen γ_c und $\varkappa_c$ sogar einzeln bestimmen können. Da wir in der vorliegenden Theorie in bezug auf γ_c ziemlich festgelegt sind ($\gamma_c \approx 40\,MeV$), würde die Bestimmung von γ_c aus der Deformationsabhängigkeit einen Test für die Güte der Theorie darstellen.

Die hier berechneten Werte von $\tilde{\gamma}_c$ sind zu vergleichen mit den Thomas-Fermi Werten $\tilde{\gamma}_c = 7.00\,MeV$ von W.D. Myers[19] und $\tilde{\gamma}_c = 15.0\,MeV$ von A.S. Tyapin[33]. Der Myerssche Wert ergibt sich als Differenz aus $\gamma_c = 9.34\,MeV$ und $\varkappa_c = 2.34\,MeV$, wobei die letzte Größe aus $\varkappa_c = \frac{\nu_k^2}{2\mu_c} = \frac{2\beta_c^2}{k_c^2\mu_c}$ mit $\beta_c = 18.560\,MeV$ und $k_c^2\mu_c = 294.80\,MeV$ unter der zusätzlichen Annahme folgt, daß in $\nu_k = \frac{2}{3k_0}\left(4\pi r_0^2\sigma_0\right)\Big|_{k_0 = k_c}$ die Oberflächenspannung σ_0 nicht von k_0 abhängt. Unter dieser Annahme wird wegen der Proportionalität $r_0 \div k_0^{-1}$ die Ableitung ν_k negativ im Gegensatz zu unseren positiven Werten in Tabelle 5, die damit eine k_0-Abhängigkeit von σ_0 anzeigen. Positives ν_k bewirkt weiterhin das eigentümliche Verhalten, daß nach Gleichung (3.43) die Mittelpunktsdichte n_0 für endliche Teilchenzahlen etwas kleiner ist als die Kernmateriedichte n_c. Allerdings ist dies nur ein $A^{-1/3}$-Effekt.

Die Ergebnisse für γ_c und $\varkappa_c$ hängen nicht sehr davon ab, was

als bester Wert für die spezifische Oberflächenenergie $\beta_{c\,exp}$ angenommen wird. Eine Änderung von $\beta_{c\,exp}$ um 1 MeV bewirkt für γ_c eine Änderung von weniger als einem Prozent; noch geringer ist der Einfluß auf ν_k und $\varkappa_c$.

Wir wollen zunächst versuchen, die relative Konstanz von γ_c bei Variation der Kastenlänge a_1 zu verstehen. Die Größe γ_c setzt sich zusammen aus dem analytisch auswertbaren Anteil $8\pi r_c \int dz\, \bar{\eta}_d(z)$ und dem Anteil $8\pi r_c \int dz\,(z - z_c)[\eta(z) - (\eta_c/n_c)n(z)]$, vgl. Gleichung (3.40). Diese Anteile sind in Tabelle 7 einzeln dargestellt ($\beta_{c\,exp} = 18.5$ MeV) . Sie zeigt, daß diese Größen auch für sich gesehen ganz schön variieren. Aus diesem Grund ist das Argument, daß die Dichten $\eta(z), n(z)$ an einen festen Wert für die Oberflächenenergie angepaßt sind und deshalb immer dieselbe Krümmungsenergie ergeben sollten, nicht überzeugend, denn dasselbe müßte dann auch für die obigen Einzelbestandteile gelten. Wir haben in Kapitel 5 gesehen, daß diese beiden Anteile sich teilweise zusammenfassen lassen. Nehmen wir zunächst einmal an, daß wir eine Wechselwirkung mit nicht so extrem großen Kraftkonstanten gewählt hätten. Dann würde vermutlich der mittlere Term in Gleichung (5.31) nur einen relativ geringen Beitrag ergeben. In den beiden andern Termen hängen nur das Kernmaterie-Einteilchenpotential $\tilde{V}(\vec{\xi})$ und seine Fouriertransformierte $V(k)$ von der effektiven Zweiteilchen-Wechselwirkung ab. Ergeben also verschiedene Wechselwirkungen in etwa das gleiche Einteilchenpotential, so werden sie auch (unter der Voraussetzung, daß der mittlere Beitrag in (5.31) unbedeutend ist) ähnliche Werte für $\lambda_{c\,pot}$ ergeben. Der kinetische Anteil zur Krümmungsspannung ist ebenfalls weitgehend von der effektiven Wechselwirkung unabhängig.

Der Einwand, daß die Wechselwirkungen trotzdem so verschiedene Kompressibilitäten liefern, kann durch den Hinweis entkräftet werden, daß es sich bei $V(k)$ ja um das Einteilchenpotential bei der festen Sättigungsdichte $n_0 = n_c$ handelt und die Kompressibilität

erst bei Variation der Dichte n_0 in Erscheinung tritt. Nun zeigt sich, daß im vorliegenden Falle der mittlere Term in (5.31) doch nicht ganz zu vernachlässigen ist. Denn der durch W_1 und W_2 charakterisierte Anteil der Wechselwirkung ergibt für den ersten und letzten Term, die ja von reinen Kernmateriegrößen abhängen, von vorneherein keinen Beitrag, so daß überhaupt nur der mittlere Term übrig bleibt. Wir haben in Tabelle 7 diesen von W_1 und W_2 herrührenden Anteil $\gamma_c^{(1,2)}$ zur spezifischen Krümmungsenergie γ_c eingetragen, sowie den gesamten restlichen von W_1 und W_2 unabhängigen Anteil $\gamma_c^{(3)}$ (also $\gamma_c = \gamma_c^{(1,2)} + \gamma_c^{(3)}$, dabei wird $\beta_{c\,exp} = 18.5\ MeV$ angenommen). Der Beitrag $\gamma_c^{(1,2)}$ ist von der Größenordnung $-10\ MeV$, seine Schwankungen von wenigen MeV sind aber von relativ geringer Bedeutung für γ_c. Die vorstehenden Überlegungen erklären auch die relative Konstanz von γ_c bei Änderung von $\beta_{c\,exp}$. Denn nur die Kraftkonstanten W_1 und W_2 werden ja von $\beta_{c\,exp}$ beeinflußt.

Weiterhin können wir vermuten, daß bei der Wahl einer (gegenüber der in dieser Arbeit benutzten) sanfteren effektiven Wechselwirkung der mittlere Term in (5.31) ziemlich zu vernachlässigen wäre, so daß sich γ_c den um etwa $10\ MeV$ größeren Werten von $\gamma_c^{(3)}$ nähern würde. Insgesamt würde das auf das Resultat hinauslaufen, daß die spezifische Krümmungsenergie γ_c in guter Näherung nicht direkt durch die effektive Wechselwirkung beeinflußt wird, sondern hauptsächlich durch Kernmaterieeigenschaften bei der Sättigungsdichte n_c und das Verhalten der Dichtematrix am Kernrand. Für das anders geartete Verhalten des von der Kompressibilität der Kernmaterie herrührenden Anteils $\tilde{\gamma}_c$ an der spezifischen $A^{1/3}$-Energie $\tilde{\gamma}_c$ sind dagegen weniger bekannte Eigenschaften wichtig, die erst bei Kernmaterie-Dichten n_0 in einem größeren Bereich um die Sättigungsdichte n_c auftreten.

Zum Schluß sei noch eine Bemerkung zur Gestaltabhängigkeit in Gleichung (3.44) gemacht. Da γ_c positiv ist, sind Kerngestalten

mit geringerer totaler Krümmung bei gleichem Flächeninhalt energetisch bevorzugt, denn $\varphi_1(\xi)$ bleibt ja dabei konstant. Auf diese Weise wird das (allerdings etwas pathologisch erscheinende) Heraustreten langer Stacheln (Igelgestalt) aus dem Kern oder die Bildung von langen engen Verbindungsröhren zwischen Kernbruchstücken beim Kernspaltungsvorgang verhindert. Trotzdem kann natürlich der gesamte $A^{1/3}$ -Koeffizient für die sphärische Kerngestalt $\tilde{\gamma}_c = \gamma_c - \varkappa_c$ durchaus negativ werden. Diese Bemerkung soll nur den sonst üblichen Einwand gegen negatives $\tilde{\gamma}_c$ entkräften. Er hätte seine Berechtigung, wenn statt der Form (3.44) die $A^{1/3}$ -Energie durch $\tilde{\gamma}_c \varphi_1(\xi) A^{1/3}$ gegeben wäre, wie etwa in der Arbeit von H.v. Groote und E. Hilf[34]. Der von ihnen festgestellte Unterschied zwischen dem durch Anpassung an Spaltbarrieren gefundenen Wert von $6 - 8$ MeV für die Krümmungsenergie und dem durch Anpassung allein an Grundzustandsenergien bestimmten Wert von etwa -11 MeV ließe sich vermutlich einfach durch die Wahl einer Gestaltabhängigkeit wie in Gleichung (3.44) beheben.

8) Zusammenfassung.

In der vorliegenden Arbeit wird der Einfluß der Krümmung der Kernoberfläche auf die energetischen Eigenschaften des Kerns untersucht. Der Ausgangspunkt ist durch die Theorie der semiinfiniten Kernmaterie[8)] gegeben, in der die Struktur der ebenen Kernoberfläche studiert wird. Die ebene Oberfläche wird charakterisiert durch eine räumliche Dichteverteilung, die nur von einer Koordinate z senkrecht zur Oberfläche abhängt und im Kerninnern $(z \to -\infty)$ sich der Kernmaterie-Sättigungsdichte n_0 nähert, im Äußeren aber $(z \to +\infty)$ exponentiell verschwindet. Dieser Dichteverlauf hat die in Elektronen-Streuexperimenten gefundene, von der Nukleonenzahl A weitgehend unabhängige Dicke des Abfallens von der Innendichte n_0 auf null zu reproduzieren. Es wird kein Unterschied zwischen dem Verhalten von Protonen und Neutronen gemacht, außerdem wird angenommen, daß ihre Anzahlen im Kern gleich sind: $N = Z$. Die Coulombkräfte werden weggelassen. Für die im vorliegenden Falle angewandte vereinfachte Hartree-Fock-Methode wird die Einteilchen-Dichtematrix aufgestellt. Ihre allgemeine Gestalt ist durch Symmetrieüberlegungen bestimmt, und zwar werden Homogenität und Isotropie in den zwei Oberflächen-Dimensionen gefordert.

Der Hartree-Fock Ausdruck für die Gesamtenergie kann als ein quadratisches Funktional der Dichtematrix aufgefaßt werden. Das Lösen der Hartree-Fock-Gleichungen ist äquivalent zur Minimalisierung der Gesamtenergie bezüglich Variation der Dichtematrix, die dabei der Zusatzbedingung $n^2 = n$ zu unterwerfen ist. Die im Ausdruck für die Gesamtenergie erscheinende Zweiteilchen-Wechselwirkung ist bei Anwendung des Hartree-Fock-Verfahrens auf die Atomhülle die freie Coulomb-Wechselwirkung. In der Kernphysik ist dagegen die Einführung einer effektiven Wechselwirkung von Vorteil. Hierdurch können die Schwierigkeiten einer genaueren Vielteilchentheorie umgangen werden; noch nicht einmal die reinen Zweiteilchenstreukräfte sind ja eindeutig bekannt. Die benutzte effektive Wechselwirkung wird so gewählt, daß sie sowohl die Kernmateriedaten:

Energie pro Teilchen $E/A = \alpha_c = -15.7\ MeV$ und die ebensogroße Fermienergie ε_c bei einer Sättigungsdichte $\eta_c = \frac{2}{3\pi^2} k_c^3 = 0.170\ f^{-3}$ $(k_c = 1.36\ f^{-1})$, als auch die Oberflächendicke $t_c = 2.3\,f$ und eine spezifische Oberflächenenergie β_c von etwa $17 - 20\ MeV$ ergibt. Eine dabei noch offen bleibende Reichweite a, dient dazu, verschiedene Kernmaterie-Kompressibilitäten durchzuspielen.

Die Auswertung der Gesamtenergie für sehr große Teilchenzahlen erfolgt durch räumliche Integration über eine aus der Hartree-Fock-Methode folgende Energiedichte $\eta(\vec{r})$. Wird dabei ein Term abgespalten, der im ganzen Kerninnern bis zur Oberfläche konstant ist, so ist der verbleibende Anteil auf die Oberflächenzone beschränkt. Unter der Annahme, daß die Energiedichte zunächst krümmungsunabhängig gedacht wird und nur vom senkrechten Abstand zur Oberfläche abhängt, kann die Gesamtenergie (näherungsweise) als Summe von drei Termen dargestellt werden. Der erste Term ist proportional zur Teilchenzahl A, der zweite Term proportional zur Oberfläche $4\pi R^2 = 4\pi r_0^2 A^{2/3}$ (bei sphärischer Kerngestalt) und der dritte Term proportional zur gesamten Krümmung $8\pi R = 8\pi r_0 A^{1/3}$. Hinzuzufügen ist dann noch ein weiterer krümmungsproportionaler Anteil, der die Abhängigkeit der Dichtematrix von der lokalen Krümmung und die hierdurch bedingte Änderung der Energiedichte berücksichtigt.

Die Krümmungsabhängigkeit der Dichtematrix $n(\vec{r}', \vec{r}'')$ ergibt sich aus folgenden Überlegungen. Es wird verlangt, daß sie für sphärische Krümmung nur abhängt von den Abständen s' und s'' ihrer Argumente $\vec{r}'$ und $\vec{r}''$ von der Oberfläche sowie von einer Größe, die ein Maß für den Öffnungswinkel zwischen den Radiusvektoren bildet, welche vom Krümmungsmittelpunkt zu den Orten $\vec{r}'$ und $\vec{r}''$ weisen. Im Kerninnern geht sie in die Kernmaterie-Dichtematrix über. Eine weitere, implizite Abhängigkeit von der lokalen Krümmung durch eine Änderung des Einteilchendichte-Profils kann für die Frage nach der Gesamtenergie auf Grund einer störungstheoretischen Argumentation außer acht gelassen werden.

Der auf diese Weise aufgestellte Energieausdruck ist zu minimalisieren in bezug auf alle noch offenen Parameter. Insbesondere ergibt die Minimalisierung bezüglich der Teilchendichte n_0 im Kerninnern wegen der endlichen Größe der Kompressibilität von Kernmaterie einen weiteren $A^{1/3}$ - proportionalen Betrag.

Die Ergebnisse zeigen, daß der nur von der Krümmung herrührende Beitrag γ_c zur $A^{1/3}$ -Energie einen Wert von etwa $40\ MeV$ hat, und zwar ziemlich unabhängig von der einen noch offengelassenen Reichweite in der effektiven Wechselwirkung. Dagegen schwankt der von der endlichen Kompressibilität herrührende Beitrag $-\varkappa_c$ zwischen $-20\ MeV$ und $-80\ MeV$. Da die gestaltabhängigen Faktoren vor γ_c und $\varkappa_c$ ein unterschiedliches Verhalten zeigen, wird man γ_c und $\varkappa_c$ einzeln bestimmen können, etwa durch Berechnung von Sattelpunktsgrößen in der Kernspaltung[34]. Dabei wird die Übereinstimmung mit der hier theoretisch berechneten Größe γ_c einen Test für die Güte der Theorie ergeben, während die Bestimmung von $\varkappa_c$ eher einen Hinweis auf die richtige Wahl der effektiven Wechselwirkung bedeutet.

Anhang.

A1) Integrale über sphärische Besselfunktionen.

Wir definieren Funktionen $a_n(x)$ und $b_n(x)$ durch

$$(1)\qquad \begin{aligned} a_n(x) &= \int_{-\infty}^{x} dx'\, j_n(x') \\ b_n(x) &= \int_{-\infty}^{x} dx'\, x' \left[j_n(x') - \hat{j}_n(x') \right] \end{aligned} ,$$

wobei $\hat{j}_n(x)$ durch

$$(2)\qquad \hat{j}_n(x) = \frac{1}{x} \sin\left(x - \frac{n}{2}\pi\right)$$

gegeben ist, sodaß asymptotisch

$$(3)\qquad j_n(x) \approx \hat{j}_n(x) + \dots \quad , \quad |x| \to \infty$$

gilt. Die Rekursionsformeln

$$(4)\qquad \begin{aligned} a_{n+1}(x) &= \frac{1}{n+1} \left[n\, a_{n-1}(x) - (2n+1)\, j_n(x) \right] \quad , \quad n = 1, 2, 3, \dots \\ a_0(x) &= \frac{\pi}{2} + Si(x) \quad , \quad a_1(x) = -\, j_0(x) \end{aligned} ,$$

und

$$(5)\qquad \begin{aligned} b_{n+1}(x) &= \frac{1}{n+1} \Big\{ (2n+1) \left(a_n(x) - x \left[j_n(x) - \hat{j}_n(x) \right] \right) \\ &\qquad + n\, b_{n-1}(x) \Big\} \quad , \quad n = 1, 2, 3, \dots \\ b_0(x) &= 0 \quad , \quad b_1(x) = \frac{\pi}{2} + Si(x) \end{aligned}$$

verifiziert man sofort mit Hilfe von [46)]

$$(6)\qquad \begin{aligned} (2n+1)\, j_n'(x) &= n\, j_{n-1}(x) - (n+1)\, j_{n+1}(x) \\ \hat{j}_n'(x) &= -\frac{1}{x}\, \hat{j}_n(x) + \hat{j}_{n-1}(x) \\ \hat{j}_{n-1}(x) &= -\, \hat{j}_{n+1}(x) \end{aligned} ,$$

durch Differentiation und vollständige Induktion.

Der in den j_n bilineare Ausdruck

$$(7)\qquad F_{n,m}(x) = \int_{-\infty}^{x} dx'\, j_n(x')\, j_m(x')$$

kann unter Verwendung der Relation

$$(8) \qquad (x^2 j_n'(x))' + [x^2 - n(n+1)]\, j_n(x) = 0$$

ausgewertet werden. Multiplikation von (8) mit $j_m(x)$ und Subtraktion der Gleichung, bei der n und m vertauscht sind, ergibt nach partieller Integration

$$F_{n,m}(x) = [n(n+1) - m(m+1)]^{-1} \{ x^2 [j_m(x)\, j_{n-1}(x) - j_n(x) j_{m-1}(x)]$$

$$(9) \qquad + \sin([m-n]\tfrac{\pi}{2}) + x(m-n) j_m(x) j_n(x) \} ,$$

$$n \neq m \quad , \quad n \neq -m-1 \quad .$$

Die Diagonalglieder $F_{n,n}$ errechnen sich rekursiv aus

$$(10) \qquad F_{n+1,n+1}(x) = \tfrac{2n+1}{2n+3} F_{n,n}(x) + \tfrac{n}{n+1} F_{n-1,n+1}(x) - \tfrac{n+2}{n+1} \tfrac{2n+1}{2n+3} F_{n+2,n}(x) - \tfrac{2n+1}{n+1} j_n(x) j_{n+1}(x) , \quad n \neq -1 .$$

Die letzte Gleichung verifiziert man wieder durch Differentiation unter Verwendung von (6). Als spezielle Werte hat man

$$(11) \qquad F_{0,0}(x) = -\tfrac{1}{x} \sin^2 x + \tfrac{\pi}{2} + Si(2x) ,$$
$$F_{0,-1}(x) = -\tfrac{1}{2x} \sin(2x) + Ci(|2x|) .$$

Schließlich gilt für

$$(12) \qquad G_{n,m}(x) = \int_{-\infty}^{x} dx'\, x' [j_n(x') - \hat{j}_n(x')] \cdot [j_m(x') - \hat{j}_m(x')]$$

die Rekursionsformel

$$(13) \qquad G_{n+1,m}(x) = - G_{n-1,m}(x) + (2n+1) [F_{n,m}(x) - F_{n,0}(x) \cos(m\tfrac{\pi}{2}) + F_{n,-1}(x) \sin(m\tfrac{\pi}{2})] ,$$

die sofort aus

$$(14) \qquad j_{n+1}(x) + j_{n-1}(x) = \tfrac{2n+1}{x} j_n(x)$$

und (2) folgt. Als Startwerte hat man

$$
\begin{aligned}
G_{0,1}(x) &= G_{0,0}(x) = 0 \quad , \\
G_{1,1}(x) &= F_{0,1}(x) + F_{0,-1}(x) \quad .
\end{aligned}
\tag{15}
$$

Mit Hilfe der hier hergeleiteten Formeln lassen sich die Integrale über die Ausdrücke (4.46) usw. auswerten, für z. Bsp.

$$\eta_{pot}(z) - \eta_{0\,pot} = \sum_{n=0}^{\infty} v_n\, j_n(2k_0 z) + \sum_{n,m=0}^{\infty} v_{n,m}\, j_n(2k_0 z)\, j_m(2k_0 z)$$

hat man

$$\int_{-\infty}^{z} dz' \left[\eta_{pot}(z') - \eta_{0\,pot}\right] = (2k_0)^{-1} \left[\sum_{n=0}^{\infty} v_n\, a_n(2k_0 z) + \sum_{n,m=0}^{\infty} v_{n,m}\, F_{n,m}(2k_0 z)\right]$$

und ebenso einfach

$$\int_{-\infty}^{z} dz'\, z' \left[\eta_{pot}(z') - \eta_{0\,pot}\right] = (2k_0)^{-2} \left[\sum_{n=0}^{\infty} v_n\, b_n(2k_0 z) + \sum_{n,m=0}^{\infty} v_{n,m}\, G_{n,m}(2k_0 z)\right] \quad .$$

A2) Wellenfunktionen im eindimensionalen Woods-Saxon-Potential.

Wir betrachten die Differentialgleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2}\psi(z) + \frac{\hbar^2}{2m}k_\xi^2\,\psi(z) - V\,u\left(\frac{z}{a}\right)\psi(z) = \varepsilon\,\psi(z) \tag{1}$$

$$u(\zeta) = (1+e^{\zeta})^{-1} .$$

Für $z \to -\infty$ (Kerninneres) ist näherungsweise

$$\psi(z) \sim \sin(-k_z z + \vartheta) \tag{2}$$

zu wählen, so daß die Energie ε durch

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2}{2m}(k_z^2 + k_\xi^2) - V \tag{3}$$

gegeben ist. Führen wir als Variable $\zeta = \frac{z}{a}$ ein und definieren

$$R = a k_z \quad , \quad Q = \left(\frac{2ma^2}{\hbar^2}V - R^2\right)^{1/2} ,$$

so folgt

$$\frac{\partial^2}{\partial\zeta^2}\psi = [(Q^2+R^2)v(\zeta) - R^2]\,\psi , \tag{4}$$

$$v(\zeta) = 1 - u(\zeta) = (1+e^{-\zeta})^{-1} .$$

Es ist zweckmäßig, $v(\zeta)$ als unabhängige Variable einzuführen, wobei

$$\frac{\partial}{\partial\zeta} = v(1-v)\frac{\partial}{\partial v} \tag{5}$$

zu setzen ist. Der Ansatz

$$\psi = \mathrm{Re}\,\varphi \quad , \quad \varphi = v^{iR}(1-v)^{Q}F(v) \tag{6}$$

bedingt für F die hypergeometrische Differentialgleichung

(7) $$v(1-v)\frac{\partial^2}{\partial v^2}F + [c-(a+b+1)v]\frac{\partial}{\partial v}F - ab\,F = 0$$

mit

(8) $$a = Q+iR \quad , \quad b = Q+iR+1 \quad , \quad c = 1+2iR \quad .$$

Die Lösung

(9) $$F = i\,e^{-i\vartheta}\,{}_2F_1\,(Q+iR\,,\,Q+iR+1;\;1+2iR\;;\;v)$$

erfüllt die asymptotische Bedingung (2), denn

(10) $$\psi \sim \sin(-R\log v + \vartheta)$$

ergibt mit $R = ak_2$ und $\log v \sim \zeta$ das Gewünschte. Die Phase ϑ erhalten wir aus der Forderung, daß ψ für $\zeta \to +\infty$ verschwinden soll. Verwenden wir[46)]

(11) $$ {}_2F_1\,(a,b;c;v) = \frac{\Gamma(c)\,\Gamma(c-a-b)}{\Gamma(c-a)\,\Gamma(c-b)}\,{}_2F_1\,(a,b;a+b+1-c\;;\;1-v)$$
$$+ (1-v)^{c-a-b}\,\frac{\Gamma(c)\,\Gamma(a+b-c)}{\Gamma(a)\,\Gamma(b)}\,{}_2F_1\,(c-a,c-b;\,c-a-b+1\;;\;1-v)$$

und berücksichtigen, daß wegen $c-a-b = -2Q$ der zweite Term für $v \to 1$ stark anwächst, so ist $i\,e^{-i\vartheta}$ so zu wählen, daß

(12) $$\mathrm{Re}\left\{ i\,e^{-i\vartheta}\,\frac{\Gamma(1+2iR)\,\Gamma(2Q)}{\Gamma(Q+iR)\,\Gamma(Q+iR+1)} \right\} = \sigma$$

wird. Definieren wir die komplexe Konstante λ durch

(13) $$\lambda = \frac{\Gamma(1+2iR)}{\Gamma(Q+iR)\,\Gamma(Q+iR+1)}\,\Gamma(2Q) \quad ,$$

so können wir für (12) auch schreiben

(14) $$\mathrm{Re}\{ i e^{-i\vartheta}\lambda \} = 0 .$$

Setzen wir also

(15) $$\vartheta = \arg(\lambda) , \quad |\vartheta| \leq \pi ,$$

so ist $\lambda = |\lambda| e^{i\vartheta}$, und die Gleichung (14) ist erfüllt. Für kleine $a k_x \ll 1$ ist λ nahezu reell, also ϑ sehr klein. Ersetzt man R durch $-R$, so geht λ nach (13) in λ^* über, und daher ϑ in $-\vartheta$. Dies sind also genau die von ϑ erwarteten Eigenschaften. Wir erhalten zunächst

(16) $$\begin{aligned} \gamma = {} & (1-v)^Q \, \mathrm{Re}\Big\{ i e^{-i\vartheta} \frac{\Gamma(1+2iR)\,\Gamma(-2Q)}{\Gamma(1+2iR-Q)\,\Gamma(2iR-Q)} \\ & v^{iR} \, {}_2F_1(Q+iR, Q+iR+1, 1+2Q, 1-v) \Big\} \\ & + (1-v)^{-Q} \, \mathrm{Re}\Big\{ i e^{-i\vartheta}\lambda \; v^{iR} \, {}_2F_1(-Q+iR, -Q+iR+1; 1-2Q; 1-v) \Big\}. \end{aligned}$$

Die Gleichung [46]

(17) $${}_2F_1(\alpha, \beta; \gamma; 1-v) = v^{\gamma-\alpha-\beta} \, {}_2F_1(\gamma-\alpha, \gamma-\beta; \gamma; 1-v) ,$$

angewandt für $\alpha = -Q+iR$, $\beta = -Q+iR+1$, $\gamma = 1-2Q$ mit $\gamma-\alpha-\beta = -2iR$ zeigt uns, daß

(18) $$\mathrm{Im}\{ v^{iR} \, {}_2F_1(-Q+iR, -Q+iR+1; 1-2Q; 1-v) \} = 0$$

ist, und entsprechend gilt dann auch

(19) $$\mathrm{Im}\{ v^{iR} \, {}_2F_1(Q+iR, Q+iR+1; 1+2Q; 1-v) \} = 0 .$$

Wegen (14) verschwindet daher der zweite Term in (16) identisch, und wir finden

(20) $$\gamma = \mu (1-v)^Q \, v^{iR} \, {}_2F_1(Q+iR, Q+iR+1; 1+2Q; 1-v)$$

mit

$$(21)\qquad \mu = \mathrm{Re}\left\{ i e^{-i\vartheta} \frac{\Gamma(1+2iR)\Gamma(-2Q)}{\Gamma(1+2iR-Q)\Gamma(2iR-Q)} \right\} = \frac{R}{2Q} \left|\lambda^{-1}\right| .$$

Die Darstellung (20) ergibt für große $\zeta \to \infty$ und unter Berücksichtigung von $1-v \sim e^{-\zeta}$ einfach

$$(22)\qquad \psi \sim \mu\, e^{-Q\zeta} ,$$

also ein exponentielles Abklingen.

In unseren Formeln ist auch der Grenzfall $a \to 0$, d.h. ein Stufenpotential, mit enthalten: Setzen wir

$$(23)\qquad r = kz \quad , \quad q = \left(\frac{2m}{\hbar^2} V - r^2\right)^{1/2} ,$$

so wird

$$(24)\qquad \begin{aligned} \lambda &= \frac{1}{2q}(q+ir) \quad , \quad \vartheta = \arctan\frac{r}{q} , \\ \mu &= \sqrt{\frac{r}{q^2+r^2}} , \\ \psi &= \sin(-rz+\vartheta) \qquad \text{für } z<0 , \\ \psi &= \sqrt{\frac{r}{q^2+r^2}}\, e^{-qz} \qquad \text{für } z>0 , \end{aligned}$$

diese Relationen kann man auch direkt aus (1) gewinnen.

A3) Orthonormierungseigenschaften.

Wir betrachten die Differentialgleichung

$$(1) \qquad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2}\psi(z) + \frac{\hbar^2}{2m}k_\varsigma^2\psi(z) + \int dz' V(k_\varsigma; z, z')\psi(z') = \varepsilon\psi(z) \quad , \quad k_\varsigma = |\vec{k}_\perp| \; .$$

Im Kerninnern denken wir uns das nichtlokale Potential wie in (4.12) vorgegeben, also

$$(2) \qquad V(k_\varsigma; z, z') = \frac{1}{2\pi}\int dk_z \; V(k_\varsigma^2 + k_z^2)\, e^{ik_z(z-z')} \quad , \quad \frac{z+z'}{2} \to -\infty \; .$$

Dann hat (1) Lösungen mit kontinuierlichem Index k_z, die für $z \to \infty$ verschwinden und für $z \to -\infty$ die Form

$$(3) \qquad \psi(k_z, z) = \sin(-k_z z + \vartheta) \quad , \quad z \to -\infty$$

annehmen. Die Energie ε ist nach (1) gegeben durch

$$(4) \qquad \varepsilon(k_z) = \frac{\hbar^2}{2m}(k_z^2 + k_\varsigma^2) + V(k_z^2 + k_\varsigma^2) \; .$$

Wir lassen hier k_ς teilweise als Argument weg, denken es uns aber fest vorgegeben. Gleichung (1) kann auch Lösungen mit diskreten Index haben, die für $z \to \infty$ und auch für $z \to -\infty$ verschwinden. Im Kerninnern haben sie die Gestalt

$$(5) \qquad \psi_\nu(z) = c \cdot e^{\varkappa_\nu z} \quad , \quad z \to -\infty \quad , \quad \varkappa_\nu > 0 \; ,$$

so daß ε nach (1) gegeben ist durch

$$(6) \qquad \varepsilon_\nu = \frac{\hbar^2}{2m}(k_\varsigma^2 - \varkappa_\nu^2) + V(k_\varsigma^2 - \varkappa_\nu^2) \; .$$

Nehmen wir vernünftigerweise an, daß $V(k^2)$ eine monoton wachsende Funktion von k^2 ist, so sind also alle ε_ν kleiner als

die $\varepsilon(k_z)$. Die Konstante in (5) sei so gewählt, daß die $\psi_\nu(z)$ auf 1 normiert sind. Dann ist der Satz $\psi_\nu(z)$ untereinander orthonormiert. Außerdem sind die $\psi_\nu(z)$ wegen $\varepsilon_\nu < \varepsilon(k_z)$ auch orthogonal zu den kontinuierlichen Wellenfunktionen $\psi(k_z, z)$. Wie sich die $\psi(k_z, z)$ untereinander verhalten, soll nun Gegenstand der weiteren Überlegungen sein. Aus (1) folgt zunächst der nach dem üblichen Verfahren gewonnene Ausdruck

$$
\begin{aligned}
&-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-L}^{\infty} dz\,\Big[\psi(k_z',z)\frac{\partial^2}{\partial z^2}\psi(k_z,z) - \psi(k_z,z)\frac{\partial^2}{\partial z^2}\psi(k_z',z)\Big] \\
&+\int_{-L}^{\infty} dz \int_{-\infty}^{+\infty} dz'\, V(k_\varrho; z,z')\Big[\psi(k_z',z)\psi(k_z,z') - \psi(k_z,z)\psi(k_z',z')\Big] \\
&\qquad = \big[\varepsilon(k_z) - \varepsilon(k_z')\big]\int_{-L}^{\infty} dz\;\psi(k_z',z)\psi(k_z,z)\,. \qquad (7)
\end{aligned}
$$

Wir nehmen an, daß $V(k_\varrho, z, z')$ reell und symmetrisch in z und z' ist und daß damit auch die $\psi(k_z, z)$ reell gewählt werden können. Von dem Ausdruck (7) werden wir später den Grenzwert $L \to \infty$ nehmen. Wir betrachten zunächst das erste Integral in (7), welches von der kinetischen Energie herrührt. Partielle Integration ergibt einen Randteil bei $z = -L$, wo die Funktionen $\psi(k_z, z)$ durch (3) gegeben sind. Man erhält nach Umformungen

$$
\begin{aligned}
&-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-L}^{\infty} dz\,\Big[\psi(k_z',z)\frac{\partial^2}{\partial z^2}\psi(k_z,z) - \psi(k_z,z)\frac{\partial^2}{\partial z^2}\psi(k_z',z)\Big] = \\
&\frac{\hbar^2}{2m}(k_z^2 - k_z'^2)\;\frac{1}{2}\Big\{-\frac{\sin\big([k_z+k_z']L+\vartheta+\vartheta'\big)}{k_z+k_z'} \\
&+\frac{\sin\big([k_z'-k_z]L+\vartheta'-\vartheta\big)}{k_z'-k_z}\Big\}\,. \qquad (8)
\end{aligned}
$$

Im zweiten Integral ersetzen wir z' durch $z'+z$ und können bei endlichem L die z und z' Integrationen vertauschen

$$(9)\qquad \int_{-L}^{\infty} dz \int_{-\infty}^{+\infty} dz'\; V(k_\varsigma; z, z')\,\left[\,\psi(k_z', z)\,\psi(k_z, z') - \psi(k_z, z)\,\psi(k_z', z')\right] =$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dz' \int_{-L}^{\infty} dz\; V(k_\varsigma; z, z+z')\,\left[\,\psi(k_z', z)\,\psi(k_z, z+z') - \psi(k_z, z)\,\psi(k_z', z+z')\right] .$$

Nun gehen wir ähnlich bei den Gleichungen (4.36) bis (4.39) angewendeten Verfahren vor. Wir substituieren bei festem z'

$$(10)\qquad z = -\tfrac{1}{2} z' + z''$$

und nehmen von dem z' Integranden nur den in z' geraden Anteil

$$\int_{-L}^{\infty} dz \int_{-\infty}^{+\infty} dz'\; V(k_\varsigma; z, z')\,\left[\,\psi(k_z', z)\,\psi(k_z, z') - \psi(k_z, z)\,\psi(k_z', z')\right] =$$

$$(11)\qquad \int_{-\infty}^{+\infty} dz'\; \tfrac{1}{2} \int_{-L+\frac{1}{2}z'}^{-L-\frac{1}{2}z'} dz''\; V(k_\varsigma; z''-\tfrac{1}{2}z', z''+\tfrac{1}{2}z')\,\left[\,\psi(k_z', z''-\tfrac{1}{2}z')\,\psi(k_z, z''+\tfrac{1}{2}z')\right.$$

$$\left. - \psi(k_z, z''-\tfrac{1}{2}z')\,\psi(k_z', z''+\tfrac{1}{2}z')\right] .$$

Die z' Integration ist wegen der endlichen Reichweite von $V(k_\varsigma; z_1, z_2)$ in bezug auf die Differenz $z_1 - z_2$ auf ein endliches z' Intervall beschränkt. Für $L \to \infty$ ist z'' nur im Kerninnern $z'' \to -\infty$ zu nehmen. Dort können wir das asymptotischen Ausdrücke (3) für ψ und (2) für V verwenden und erhalten nach leichten Umformungen das Resultat

$$\int_{-L}^{\infty} dz \int_{-\infty}^{+\infty} dz'\; V(k_\varsigma; z, z')\,\left[\,\psi(k_z', z)\,\psi(k_z, z') - \psi(k_z, z)\,\psi(k_z', z')\,\right] =$$

$$(12)\qquad \left[\,V(k_\varsigma^2 + k_z^2) - V(k_\varsigma^2 + k_z'^2)\right]\,\tfrac{1}{2}\,\left\{ - \frac{\sin\left([k_z + k_z']L + \vartheta + \vartheta'\right)}{k_z + k_z'}\right.$$

$$\left. + \frac{\sin\left([k_z' - k_z]L + \vartheta' - \vartheta\right)}{k_z' - k_z}\right\} .$$

Die Grenzwerte für $L \to \infty$ in (7) existieren also nur im Sinne der Distributionstheorie. Beachten wir den Ausdruck (4) für $\varepsilon(k_z)$, so folgt aus (7), (8) und (12) einfach

$$\int_{-L}^{\infty} dz\ \psi(k_z', z)\ \psi(k_z, z) = \frac{1}{2}\left\{ - \frac{\sin\left([k_z + k_z']L + \vartheta + \vartheta'\right)}{k_z + k_z'} + \frac{\sin\left([k_z' - k_z]L + \vartheta' - \vartheta\right)}{k_z' - k_z} \right\}, \tag{13}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dz\ \psi(k_z', z)\,\psi(k_z, z) = \frac{\pi}{2}\left\{ -\delta(k_z + k_z') + \delta(k_z - k_z') \right\}, \tag{14}$$

also der in (2. 15a) stehende Ausdruck.

A4) Zur Berechnung der Oberflächendicke.

Wir betrachten zunächst einen Dichteverlauf in Gestalt einer Fermifunktion

$$(1) \qquad n(z) = n_0 \, (1 + e^{z/a})^{-1} \, .$$

Für sie verschwindet die Größe

$$(2) \qquad z_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} dz \, \left[\frac{n(z)}{n_0} - \theta(-z) \right] \, ,$$

und es gilt die Beziehung

$$(3) \qquad \int_{-\infty}^{+\infty} dz \, (z - z_0) \left[\frac{n(z)}{n_0} - \theta(-z+z_0) \right] = \frac{\pi^2}{6} a^2 \, .$$

Werden die Koordinaten z_{01} und z_{09} definiert durch

$$n(z_{09}) = 0.9 \, n_0 \, ,$$

$$n(z_{01}) = 0.1 \, n_0 \, ,$$

so berechnet sich ihre Differenz für die Dichteverteilung (1) zu

$$(4) \qquad z_{01} - z_{09} = a \, \ln 81 \, .$$

Entsprechend einem Vorschlag von G. Süßmann[48] definieren wir nun für eine beliebige Dichteverteilung ihre Oberflächendicke zu

$$(5) \qquad t_0 = \ln 81 \left\{ \frac{6}{\pi^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \, (z - z_0) \left[\frac{n(z)}{n_0} - \theta(z_0 - z) \right] \right\}^{1/2} .$$

Die Faktoren sind dann offenbar so gewählt, daß insbesondere für den Dichteverlauf (1) die 90% - 10% Dicke (4) das Ergebnis ist. Man kann in (5) das Integral durch partielle Integration umformen, wenn die dabei auftretenden Randteile verschwinden und auch das neu gebildete Integral konvergiert

$$(6) \qquad t_0 = \ln 81 \left\{ \frac{3}{\pi^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dz\, (z - z_0)^2 \frac{d}{dz} \frac{n(z)}{n_0} \right\}^{1/2}.$$

Bei den von uns betrachteten Dichten ist (wegen der Schärfe der Fermikante) das Integral (6) divergent, daher müssen wir (5) als Definitionsgleichung verwenden. Mit der Beziehung (2) kann auch die für numerische Zwecke etwas bequemere Gleichung

$$(7) \qquad t_0 = \ln 81 \left\{ \frac{6}{\pi^2} \left(-\frac{1}{2} z_0^2 + \int_{-\infty}^{+\infty} dz\, z \left[\frac{n(z)}{n_0} - \Theta(-z) \right] \right) \right\}^{1/2}$$

hergeleitet werden.

B1) Zusammenhang zwischen dem Hartree-Fock-Verfahren und der Variationsmethode für die semiinfinite Kernmaterie mit ebener Oberfläche.

In Analogie zum Hartree-Fock-System (1.2) für endliche Teilchenzahlen wird man für die semiinfinite Kernmaterie folgendes Gleichungssystem aufstellen

$$(1)\quad \left(\frac{\hbar^2}{2m}\vec{k}_\perp^{\,2} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi(z) + \int d\vec{\xi}^{\,3}\,\tilde{V}([z-\tfrac{1}{2}\zeta]\vec{e}_z, \vec{\xi})\, e^{-i\vec{k}_\perp\vec{\xi}_\perp}\,\psi(z-\zeta) = \varepsilon\,\psi(z)\,,$$

$$(2)\quad \psi(z) = \left\{\begin{array}{c}\psi(|\vec{k}_\perp|, k_z, z)\\ \psi_\nu(|\vec{k}_\perp|, z)\end{array}\right\}\,, \qquad \varepsilon = \left\{\begin{array}{l}\varepsilon(|\vec{k}|) = \frac{\hbar^2}{2m}\vec{k}^2 + V(|\vec{k}|)\\ \varepsilon_\nu(|\vec{k}_\perp|)\end{array}\right\}\,,$$

$$(3)\quad \left\{\begin{array}{ll}\psi(|\vec{k}_\perp|, k_z, z) \to 0 & , \; z \to +\infty\,,\\ \psi(|\vec{k}_\perp|, k_z, z) = \sin(-k_z z + \vartheta) & , \; z \to -\infty\,,\\ \int dz\, |\psi_\nu(|\vec{k}_\perp|, z)|^2 = 1 & ,\end{array}\right.$$

$$(4)\quad \tilde{V}(\vec{r}, \vec{\xi}) = \int d\vec{r}\,'^3\, \tilde{n}(\vec{r}\,', \vec{\xi})\, \hat{u}(\vec{r}-\vec{r}\,', 2\vec{\xi})\,,$$

$$(5)\quad \left\{\begin{array}{l}\tilde{n}(\vec{r}, \vec{\xi}) = \tilde{n}_k(\vec{r}, \vec{\xi}) + \tilde{n}_d(\vec{r}, \vec{\xi})\,,\\ \tilde{n}_k(\vec{r}, \vec{\xi}) = \frac{g}{(2\pi)^3}\int d\vec{k}^{\,3}\,\theta(k_0^2 - \vec{k}^2)\, e^{i\vec{k}_\perp\vec{\xi}_\perp}\,\psi(|\vec{k}_\perp|, k_z, z+\tfrac{1}{2}\zeta)\,\psi(|\vec{k}_\perp|, k_z, z-\tfrac{1}{2}\zeta)^*\,,\\ \tilde{n}_d(\vec{r}, \vec{\xi}) = \frac{1}{(2\pi)^2}\int d\vec{k}_\perp^{\,2}\, e^{i\vec{k}_\perp\vec{\xi}_\perp}\sum_\nu 4\,\theta(\varepsilon_0 - \varepsilon_\nu(|\vec{k}_\perp|))\,\psi_\nu(|\vec{k}_\perp|, z+\tfrac{1}{2}\zeta)\,\psi_\nu(|\vec{k}_\perp|, z-\tfrac{1}{2}\zeta)^*\,.\end{array}\right.$$

Hierbei tritt der Fermiimpuls $\hbar k_0$ als Parameter auf. Die Differentialgleichung (1) hat die kontinuierlichen und diskreten Wellenfunktionen in (2) als Lösungen. Die Wellenfunktionen sind entsprechend (3) zu normieren. Aus diesen Wellenfunktionen muß sich dann nach (4) und (5) wieder das Einteilchenpotential $\tilde{V}$ in (1) berechnen lassen (Selbstkonsistenz).

Wir wollen annehmen, daß das System der Gleichungen (1) bis (5) eine Lösung hat. Wir definieren Vergleichsfunktionen $\chi_a(z)$ durch eine zu (1) analoge Gleichung

$$(6)\qquad \left(\frac{\hbar^2}{2m}\vec{k}_\perp^{\,2} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\chi_a(z) + \int d\vec{\xi}^{\,3}\, \tilde{V}_a([z-\tfrac{1}{2}\zeta]\vec{e}_z, \vec{\xi})\, e^{-i\vec{k}_\perp\vec{\xi}_\perp}\, \chi_a(z-\zeta) = \varepsilon_a\, \chi_a(z)$$

mit einem Einteilchenpotential $\tilde{V}_a(z\vec{e}_z, \vec{\xi})$, das für $z \to -\infty$ von z unabhängig wird, so daß (6) kontinuierliche Lösungen $\chi_a(|\vec{k}_\perp|, k_z, z)$ und (eventuell) diskrete Lösungen $\chi_{a\nu}(|\vec{k}_\perp|, z)$ hat, die wie (3) normierbar sind. Der Index a steht für einen Parametersatz a , der das Einteilchenpotential $\tilde{V}_a$ charakterisiert. Aus den Wellenfunktionen $\chi_a(z)$ denken wir uns wieder eine Einteilchen-Dichtematrix $\tilde{n}_a(\vec{r}, \vec{\xi})$ nach dem Schema (5) aufgebaut. Für einen speziellen Satz $a = a_c$ sollen sich die Hartree-Fock-Wellenfunktionen χ und das Hartree-Fock-Einteilchenpotential $\tilde{V}$ ergeben:

$$(7)\qquad \chi_{a_c}(z) = \chi(z) \;;\quad \tilde{V}_{a_c}(z\vec{e}_z, \vec{\xi}) = \tilde{V}(z\vec{e}_z, \vec{\xi}) ,$$
$$\tilde{n}_{a_c}(\vec{r}, \vec{\xi}) = \tilde{n}(\vec{r}, \vec{\xi}) .$$

Wir wollen fragen, ob die Oberflächenspannung

$$(8)\qquad \sigma_a = \int dz\, [\eta_a(z) - (\eta_0/n_0)\, n_a(z)]$$

mit

$$(9)\qquad \eta_a(z) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial \vec{r}'^2}\, \tilde{n}_a\left(\frac{\vec{r}'+\vec{r}''}{2}, \vec{r}'-\vec{r}''\right)\Big|_{\vec{r}'=\vec{r}''=\vec{r}} + \tfrac{1}{2}\int d\vec{r}'^{\,3}\int d\vec{\xi}^{\,3}\, \tilde{n}_a(z\vec{e}_z, -\vec{\xi})\, \tilde{n}_a([z+z']\vec{e}_z, \vec{\xi})\; \hat{u}(-\vec{r}', 2\vec{\xi})$$

stationär ist $\partial\sigma_a/\partial a = 0$ für $a = a_c$.

Zunächst ist zu bemerken, daß die Differentiation $\partial/\partial a$ mit dem Limes an der unteren Grenze in (8) vertauschbar ist

$$(10)\qquad \frac{\partial}{\partial a}\lim_{L\to\infty}\int_{-L}^{\infty} dz\, [\eta_a(z) - (\eta_0/n_0)\, n_a(z)] = \lim_{L\to\infty}\frac{\partial}{\partial a}\int_{-L}^{\infty} dz\, [\eta_a(z) - (\eta_0/n_0)\, n_a(z)]$$
$$= \lim_{L\to\infty}\int_{-L}^{\infty} dz\, \left[\frac{\partial}{\partial a}\eta_a(z) - (\eta_0/n_0)\frac{\partial}{\partial a} n_a(z)\right] ,$$

denn $\eta_a(z) - (\eta_0/n_0)\, n_a(z)$ verhält sich für $z \to -\infty$ wie $(2k_0 z)^{-2} \sin(2k_0 z)$.

Mit der Energiedichte $\eta_a(z)$ aus (9) und der analog zu (5) gebildeten Dichtematrix $\tilde{n}_a(\vec{r}, \vec{\xi})$ ergibt sich

$$(11)\quad \int_{-L}^{\infty} dz \left[\frac{\partial}{\partial a} \eta_a(z) - (\eta_0/n_0) \frac{\partial}{\partial a} n_a(z) \right]_{a=a_c} = \tau_1(L, a_c) + \tau_2(L, a_c) ,$$

$$\begin{aligned}(12)\quad \tau_1(L, a_c) = \int_{-L}^{\infty} dz \Big[& \frac{g}{(2\pi)^3} \int d\vec{k}^3\, \theta(k_0^2 - \vec{k}^2) \Big\{ \frac{\partial}{\partial a} \Big[\chi_a(|\vec{k}_\perp|, k_z, z)^* \Big(\frac{\hbar^2}{2m} \vec{k}_\perp^{\,2} \\ & - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{\eta_0}{n_0} \Big) \chi_a(|\vec{k}_\perp|, k_z, z) \Big]_{a=a_c} + \int d\vec{\xi}^3\, \tilde{V}(z\vec{e}_z, \vec{\xi}) \\ & e^{-i\vec{k}_\perp \vec{\xi}_\perp} \frac{\partial}{\partial a} \Big[\chi_a(|\vec{k}_\perp|, k_z, z + \tfrac{1}{2}\zeta)^* \chi_a(|\vec{k}_\perp|, k_z, z - \tfrac{1}{2}\zeta) \Big]_{a=a_c} \Big\} \\ + & \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\vec{k}_\perp^{\,2} \sum_\nu \Big\{ \frac{\partial}{\partial a} \Big[4\,\theta(\varepsilon_0 - \varepsilon_{a\nu}(|\vec{k}_\perp|)) \chi_{a\nu}(|\vec{k}_\perp|, z)^* \\ & \cdot \Big(\frac{\hbar^2}{2m} \vec{k}_\perp^{\,2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{\eta_0}{n_0} \Big) \chi_{a\nu}(|\vec{k}_\perp|, z) \Big]_{a=a_c} + \int d\vec{\xi}^3\, \tilde{V}(z\vec{e}_z, \vec{\xi}) \\ & e^{-i\vec{k}_\perp \vec{\xi}_\perp} \frac{\partial}{\partial a} \Big[4\,\theta(\varepsilon_0 - \varepsilon_{a\nu}(|\vec{k}_\perp|)) \chi_{a\nu}(|\vec{k}_\perp|, z + \tfrac{1}{2}\zeta)^* \\ & \chi_{a\nu}(|\vec{k}_\perp|, z - \tfrac{1}{2}\zeta) \Big]_{a=a_c} \Big\} \Big] ,\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}(13)\quad \tau_2(L, a) = & \frac{1}{2} \int dz' \int d\vec{\xi}^3 \int d\vec{r}_\perp'^{\,2} \int_{-L}^{\infty} dz\, \hat{U}(-z'\vec{e}_z - \vec{r}_\perp', z\vec{\xi}) \\ & \cdot \Big\{ \tilde{n}_a(z\vec{e}_z, -\vec{\xi}) \Big[\frac{\partial}{\partial a} \tilde{n}_a([z+z']\vec{e}_z, \vec{\xi}) \Big] - \tilde{n}_a([z+z']\vec{e}_z, \vec{\xi}) \\ & \cdot \Big[\frac{\partial}{\partial a} \tilde{n}_a(z\vec{e}_z, -\vec{\xi}) \Big] \Big\}\end{aligned}$$

In (12) haben wir die Definition (4) benutzt. Wir formen τ_2 um, indem wir $z = z'' - \frac{1}{2} z'$ bei festgehaltenem z' substituieren

$$\begin{aligned}(14)\quad \tau_2(L, a) = & \frac{1}{2} \int dz' \int d\vec{\xi}^3 \int d\vec{r}_\perp'^{\,2} \hat{U}(-z'\vec{e}_z - \vec{r}_\perp', z\vec{\xi}) \int_{-L+\frac{1}{2}z'}^{\infty} dz'' \\ & \Big\{ \tilde{n}_a([z'' - \tfrac{1}{2}z']\vec{e}_z, -\vec{\xi}) \Big[\frac{\partial}{\partial a} \tilde{n}_a([z'' + \tfrac{1}{2}z']\vec{e}_z, \vec{\xi}) \Big] \\ & - \tilde{n}_a([z'' + \tfrac{1}{2}z']\vec{e}_z, \vec{\xi}) \Big[\frac{\partial}{\partial a} \tilde{n}_a([z'' - \tfrac{1}{2}z']\vec{e}_z, -\vec{\xi}) \Big] \Big\} .\end{aligned}$$

Zur $\int dz'$ - Integration haben wir nur den in z' geraden Anteil des Integranden zu berücksichtigen nach dem Schema

$$\int dz' \int_{-L+\frac{1}{2}z'}^{\infty} dz''\, g(z'',z') \;=\; \tfrac{1}{2} \int dz' \int_{-L+\frac{1}{2}z'}^{-L-\frac{1}{2}z'} dz''\, g(z'',z') \quad ,$$

wobei der Integrand ungerade $g(z'',z') = -g(z'',-z')$ in z' ist. Da die $\int dz'$ - Integration durch die Kurzreichweitigkeit von $\hat{u}$ beschränkt ist, ist für hinreichend großes L in

$$\begin{aligned} \tau_2(L,a) \;=\; & \tfrac{1}{2} \int dz' \int d\vec{\xi}^{\,3} \int d\vec{r}_\perp'^{\,2}\, \hat{U}(-z'\vec{e}_z - \vec{r}_\perp', 2\vec{\xi}) \; \tfrac{1}{2} \int_{-L+\frac{1}{2}z'}^{-L-\frac{1}{2}z'} dz'' \\ & \cdot \Big\{ \tilde{n}_a([z''-\tfrac{1}{2}z']\vec{e}_z, -\vec{\xi}) \, [\tfrac{\partial}{\partial a} \tilde{n}_a([z''+\tfrac{1}{2}z']\vec{e}_z, \vec{\xi})] \\ & - \tilde{n}_a([z''+\tfrac{1}{2}z']\vec{e}_z, \vec{\xi}) \, [\tfrac{\partial}{\partial a} \tilde{n}_a([z''-\tfrac{1}{2}z']\vec{e}_z, -\vec{\xi})] \Big\} \end{aligned} \tag{15}$$

die Kernmaterie-Dichtematrix $\tilde{n}(\vec{\xi})$ einzusetzen, die weder vom Parametersatz a noch von der Schwerpunktskoordinate $z = z'' \pm \frac{1}{2}z'$ abhängt. Damit verschwindet die geschweifte Klammer in (15), und es ist

$$\lim_{L\to\infty} \tau_2(L,a_c) \;=\; 0 \tag{16}$$

Zur weiteren Umformung von $\tau_1(L,a_c)$ in (12) möchten wir die Gleichung (1) sowie ihre konjugiert komplexe Form

$$\Big(\tfrac{\hbar^2}{2m}\vec{k}_\perp^{\,2} - \tfrac{\hbar^2}{2m}\tfrac{\partial^2}{\partial z^2}\Big)\psi^*(z) + \int d\vec{\xi}^{\,3}\, \tilde{V}([z+\tfrac{1}{2}\zeta]\vec{e}_z, \vec{\xi})\, e^{-i\vec{k}_\perp\vec{\xi}_\perp} \cdot \psi^*(z+\zeta) \;=\; \varepsilon\, \psi^*(z) \tag{1a}$$

verwenden. Dies geht nur durch Hinzunahme von weiteren Korrekturen

$$\tau_1(L,a_c) \;=\; \tau_1^{\mathrm{I}}(L,a_c) + \tau_1^{\mathrm{II}}(L,a_c) + \tau_1^{\mathrm{III}}(L,a_c) \quad , \tag{17}$$

$$\tau_1^{I}(L,a_c) = \frac{g}{(2\pi)^3}\int d\vec{k}^3\,\theta(k_0^2-\vec{k}^2)\left[\varepsilon(\vec{k})-\frac{\eta_0}{n_0}\right]\int_{-L}^{\infty}dz$$

$$\cdot\frac{\partial}{\partial a}\left[\chi_a(|\vec{k}_\perp|,k_z,z)^*\,\chi_a(|\vec{k}_\perp|,k_z,z)\right]_{a=a_c} \tag{18}$$

$$+\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\vec{k}_\perp^{\,2}\int_{-L}^{\infty}dz\sum_\nu\left(\varepsilon_{a\nu}(|\vec{k}_\perp|)-\frac{\eta_0}{n_0}\right)\frac{\partial}{\partial a}\left[4\,\theta(\varepsilon_0-\varepsilon_{a\nu}(|\vec{k}_\perp|))\right.$$

$$\left.\chi_{a\nu}(|\vec{k}_\perp|,z)^*\,\chi_{a\nu}(|\vec{k}_\perp|,z)\right]_{a=a_c},$$

$$\tau_1^{II}(L,a_c) = \int d\vec{\xi}^{\,3}\int_{-L}^{\infty}dz\left[\iota(z,\vec{\xi})-\iota(z-\tfrac{1}{2}\zeta,\vec{\xi})\right.$$

$$\left.+\,\iota(z,\vec{\xi})^*-\iota(z+\tfrac{1}{2}\zeta,\vec{\xi})^*\right], \tag{19}$$

$$\iota(z,\vec{\xi}) = \frac{g}{(2\pi)^3}\int d\vec{k}^{\,3}\,\theta(k_0^2-\vec{k}^2)\,\tilde{V}(z\vec{e}_z,\vec{\xi})\,e^{-i\vec{k}_\perp\vec{\xi}_\perp}$$

$$\left[\frac{\partial}{\partial a}\chi_a(|\vec{k}_\perp|,k_z,z+\tfrac{1}{2}\zeta)^*\right]\chi_a(|\vec{k}_\perp|,k_z,z-\tfrac{1}{2}\zeta)\Big|_{a=a_c} \tag{20}$$

$$+\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\vec{k}_\perp^{\,2}\sum_\nu 4\,\theta(\varepsilon_0-\varepsilon_{a\nu}(|\vec{k}_\perp|))\,\tilde{V}(z\vec{e}_z,\vec{\xi})\,e^{-i\vec{k}_\perp\vec{\xi}_\perp}$$

$$\left[\frac{\partial}{\partial a}\chi_{a\nu}(|\vec{k}_\perp|,z+\tfrac{1}{2}\zeta)^*\right]\chi_{a\nu}(|\vec{k}_\perp|,z-\tfrac{1}{2}\zeta)\Big|_{a=a_c},$$

$$\tau_1^{III}(L,a_c) = \frac{g}{(2\pi)^3}\int d\vec{k}^{\,3}\,\theta(k_0^2-\vec{k}^2)\int_{-L}^{\infty}dz\left\{\chi_a(|\vec{k}_\perp|,k_z,z)^*\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)\right.$$

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2}\left[\frac{\partial}{\partial a}\chi_a(|\vec{k}_\perp|,k_z,z)\right]-\left[\frac{\partial}{\partial a}\chi_a(|\vec{k}_\perp|,k_z,z)\right]\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right) \tag{21}$$

$$\left.\frac{\partial^2}{\partial z^2}\chi_a(|\vec{k}_\perp|,k_z,z)^*\right\}_{a=a_c}+\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\vec{k}_\perp^{\,2}\sum_\nu 4\,\theta(\varepsilon_0-\varepsilon_{a\nu}(|\vec{k}_\perp|))$$

$$\int_{-L}^{\infty}dz\left\{\chi_{a\nu}(|\vec{k}_\perp|,z)^*\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)\frac{\partial^2}{\partial z^2}\left[\frac{\partial}{\partial a}\chi_{a\nu}(|\vec{k}_\perp|,z)\right]\right.$$

$$\left.-\left[\frac{\partial}{\partial a}\chi_{a\nu}(|\vec{k}_\perp|,z)\right]\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)\frac{\partial^2}{\partial z^2}\chi_{a\nu}(|\vec{k}_\perp|,z)^*\right\}_{a=a_c}.$$

Aus (19) finden wir durch Substitution

$$
\begin{aligned}
\tau_1^{II}(L,a_c) &= \int d\vec{\xi}^3 \Big[\Big\{ \int_{-L}^{\infty} dz - \int_{-L-\frac{1}{2}\zeta}^{\infty} dz \Big\} \iota(z,\vec{\xi}) + \Big\{ \int_{-L}^{\infty} dz - \int_{-L+\frac{1}{2}\zeta}^{\infty} dz \Big\} \iota(z,-\vec{\xi})^* \\
&= \int d\vec{\xi}^3 \Big[\int_{-L}^{-L-\frac{1}{2}\zeta} dz\, \iota(z,\vec{\xi}) + \int_{-L}^{-L+\frac{1}{2}\zeta} dz\, \iota(z,-\vec{\xi})^* \Big] \qquad (22)
\end{aligned}
$$

Wir wählen L so groß, daß der Beitrag der diskreten Wellenfunktionen schon exponentiell abgeklungen ist und die kontinuierlichen Wellenfunktionen in reine Sinuswellen übergegangen sind

$$
\begin{aligned}
\iota(z,\vec{\xi}) &= \frac{g}{(2\pi)^3} \int d\vec{k}^3\, \theta(k_0^2-\vec{k}^2)\, e^{-i\vec{k}_\perp\vec{\xi}_\perp}\, \tilde{V}(\vec{\xi})\, \tfrac{1}{2} \big[\sin(-2k_z z + 2\vartheta) \\
&\quad + \sin(k_z\zeta) \big] \frac{\partial}{\partial a}\vartheta_{a_c} \qquad (23) \\
\vartheta &= \vartheta_a(|\vec{k}_\perp|, k_z) \,.
\end{aligned}
$$

Wir finden

$$
\begin{aligned}
\tau_1^{II}(L,a_c) &= \frac{g}{(2\pi)^3} \int d\vec{k}^3\, \theta(k_0^2-\vec{k}^2) \int d\vec{\xi}^3\, e^{-i\vec{k}_\perp\vec{\xi}_\perp}\, \tilde{V}(\vec{\xi}) \\
&\quad \cdot \Big\{ \cos(2k_z L) \Big[\frac{\cos(k_z\zeta)-1}{2k_z} \cos(2\vartheta) + \frac{\sin(k_z\zeta)}{2k_z} \sin(2\vartheta) \Big] \\
&\quad - \frac{\sin(2k_z L)}{2k_z} \big[(\cos(k_z\zeta)-1)\sin(2\vartheta) + \sin(k_z\zeta)\cos(2\vartheta) \big] \\
&\quad - \tfrac{1}{2}\zeta \sin(k_z\zeta) \Big\} \frac{\partial}{\partial a}\vartheta_{a_c} \,. \qquad (24)
\end{aligned}
$$

Nun gilt im Sinne der Distributionstheorie

$$
\begin{aligned}
\lim_{L\to\infty} \frac{\sin(2k_z L)}{2k_z} &= \pi\,\delta(2k_z) \,, \\
\lim_{L\to\infty} \cos(2k_z L) &= 0 \,, \qquad (25)
\end{aligned}
$$

so daß in (24) allein

$$
\begin{aligned}
\lim_{L\to\infty} \tau_1^{II}(L,a_c) &= \frac{g}{(2\pi)^3} \int d\vec{k}^3\, \theta(k_0^2-\vec{k}^2) \int d\vec{\xi}^3\, e^{-i\vec{k}_\perp\vec{\xi}_\perp}\, \tilde{V}(\vec{\xi}) \\
&\quad \cdot \tfrac{1}{2} \Big[\frac{\partial}{\partial k_z} \cos(k_z\zeta) \Big] \frac{\partial}{\partial a}\vartheta_{a_c} \qquad (26) \\
&= \frac{g}{(2\pi)^3} \int d\vec{k}^3\, \theta(k_0^2-\vec{k}^2)\, \tfrac{1}{2} \Big[\frac{\partial}{\partial k_z} V(k) \Big] \frac{\partial}{\partial a}\vartheta_{a_c} \,.
\end{aligned}
$$

übrig bleibt. Die Auswertung von τ_1^{III} in (21) gelingt durch partielle Integration. Wir wählen wieder L so groß, daß wir die Randteile der diskreten Wellenfunktionen weglassen können:

$$\tau_1^{III}(L,a_c) = -\frac{g}{(2\pi)^3}\int d\vec{k}^3\,\theta(k_0^2-\vec{k}^2)\,\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)\Big\{\chi_a(|\vec{k}_\perp|,k_z,z)^*\,\frac{\partial}{\partial a}\frac{\partial}{\partial z}$$
$$\cdot\,\chi_a(|\vec{k}_\perp|,k_z,z) - \Big[\frac{\partial}{\partial a}\chi_a(|\vec{k}_\perp|,k_z,z)\Big]\frac{\partial}{\partial z}\chi_a(|\vec{k}_\perp|,k_z,z)^*\Big\}_{\substack{a=a_c\\ z=-L}} . \tag{27}$$

Setzen wir hier für χ_a reine Sinuswellen ein, so folgt

$$\tau_1^{III}(L,a_c) = \frac{g}{(2\pi)^3}\int d\vec{k}^3\,\theta(k_0^2-\vec{k}^2)\,\frac{\hbar^2}{2m}\,k_z\,\frac{\partial}{\partial a}\vartheta_{a_c} . \tag{28}$$

Dieses Ergebnis fassen wir mit (26) zusammen

$$\lim_{L\to\infty}\Big\{\tau_1^{II}(L,a_c)+\tau_1^{III}(L,a_c)\Big\} = \frac{g}{(2\pi)^3}\int d\vec{k}^3\,\theta(k_0^2-\vec{k}^2)\,\frac{1}{2}\,\frac{\partial\varepsilon(k)}{\partial k_z}\,\frac{\partial}{\partial a}\vartheta_{a_c} . \tag{29}$$

Jetzt können wir uns der weiteren Auswertung von τ_1^{I} nach Gleichung (18) zuwenden. Dort können wir für endliches L die Differentiation $\partial/\partial a$ mit der Integration $\int_{-L}^{\infty} dz$ vertauschen. Wir wählen L wieder hinreichend groß, so daß bereits die Gleichungen

$$\int_{-L}^{\infty} dz\;\chi_{a\nu}(|\vec{k}_\perp|,z)^*\,\chi_{a\nu}(|\vec{k}_\perp|,z) = 1 ,$$
$$\int_{-L}^{\infty} dz\;\chi_a(|\vec{k}_\perp|,k_z,z)^*\,\chi_a(|\vec{k}_\perp|,k_z,z) = \frac{1}{2}\Big\{-\frac{\sin(2k_zL+2\vartheta)}{2k_z}+L+\frac{\partial\vartheta}{\partial k_z}\Big\} \tag{30}$$

gelten. Hierbei haben wir die Gleichung (13) aus dem Anhang A3 für $k_z' = k_z$ benutzt. Wir finden somit

$$\tau_1^{I}(L,a_c) = \frac{g}{(2\pi)^3}\int d\vec{k}^3\,\theta(k_0^2-\vec{k}^2)\,\Big[\varepsilon(k)-\frac{\eta_0}{n_0}\Big]\Big\{-\frac{1}{2}\,\frac{\sin(2k_zL)}{2k_z}\,\frac{\partial}{\partial a}\cos\vartheta$$
$$-\frac{1}{2}\cos(2k_zL)\,\frac{\partial}{\partial a}\,\frac{\sin(2\vartheta)}{2k_z}+\frac{1}{2}\,\frac{\partial}{\partial k_z}\,\frac{\partial\vartheta}{\partial a}\Big\}_{a=a_c}$$
$$+\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\vec{k}_\perp^{\,2}\sum_\nu\Big(\varepsilon_{a\nu}(|\vec{k}_\perp|)-\frac{\eta_0}{n_0}\Big)\,\frac{\partial}{\partial a}\Big[4\,\theta(\varepsilon_0-\varepsilon_{a\nu}(|\vec{k}_\perp|)\Big]_{a=a_c} . \tag{31}$$

Hieraus folgt unter Zuhilfenahme von (25) und Berücksichtigung von $\frac{\partial}{\partial a}\cos\vartheta|_{k_z=0} = 0$ wegen $\cos\vartheta|_{k_z=0} = 1$ für jedes a die Relation

$$\lim_{L\to\infty} \tau_1^I(L,a_c) = \frac{g}{(2\pi)^3}\int d\vec{k}^3\,\theta(k_0^2-\vec{k}^2)\left[\varepsilon(k)-\frac{\eta_0}{n_0}\right]\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial k_z}\frac{\partial}{\partial a}\vartheta_{a_c}(|k_\perp|,k_z)$$

(32)

$$+\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\vec{k}_\perp^{\,2}\sum_\nu\left(\varepsilon_{a\nu}(|\vec{k}_\perp|)-\frac{\eta_0}{n_0}\right)\frac{\partial}{\partial a}\left[4\,\theta(\varepsilon_0-\varepsilon_{a\nu}(|\vec{k}_\perp|))\right]_{a=a_c}.$$

Dieses Ergebnis können wir mit (29) zusammenfassen und erhalten nach (8), (11), (16) gerade den gesuchten Ausdruck

$$\frac{\partial}{\partial a}\sigma_{a_c} = \frac{g}{(2\pi)^3}2\pi\int_0^{k_0}dk_\varsigma\,k_\varsigma\int_{-\sqrt{k_0^2-k_\varsigma^2}}^{\sqrt{k_0^2-k_\varsigma^2}}dk_z\;\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial k_z}\left\{\left[\varepsilon(k)-\frac{\eta_0}{n_0}\right]\frac{\partial}{\partial a}\vartheta_{a_c}\right\}$$

(33)

$$+\frac{1}{(2\pi)^2}\sum_\nu 2\pi\left[\frac{\partial}{\partial a}\int_0^{k_{a\nu}}dk_\varsigma\,k_\varsigma\right]_{a=a_c}4\left(\varepsilon_{a\nu}(k_\varsigma)-\frac{\eta_0}{n_0}\right),$$

wobei $k_{a\nu}$ definiert ist durch

$$\varepsilon_{a\nu}(k_{a\nu}) = \varepsilon_0 = \varepsilon(k_0) \qquad (34)$$

Im zweiten Anteil, der von den diskreten Wellenfunktionen herrührt, soll die Differentiation nur auf die Integrationsgrenze $k_{a\nu}$ der $\int dk_\varsigma$ -Integration wirken. Dies ergibt

$$\frac{\partial}{\partial a}\sigma_{a_c} = \left[\varepsilon_0-\frac{\eta_0}{n_0}\right]\left\{\frac{g}{(2\pi)^2}\int_0^{k_0}dk_\varsigma\,k_\varsigma\,\frac{\partial}{\partial a}\vartheta_{a_c}(k_\varsigma,\sqrt{k_0^2-k_\varsigma^2})\right.$$

(35)

$$\left.+\frac{4}{(2\pi)}\sum_\nu k_{a\nu}\frac{\partial}{\partial a}k_{a_c\nu}\right\}.$$

Die Oberflächenspannung, ausgewertet mit den Hartree-Fock-Wellenfunktionen aus dem System (1) bis (5), ist daher im allgemeinen

nur dann stationär, wenn die Fermienergie $\varepsilon_0 = \varepsilon(k_0)$ gleich der Energie pro Teilchen $\alpha_0 = \eta_0 / n_0$ in Kernmaterie ist. Man muß also sinnvollerweise bei der Anwendung der Hartree-Fock-Methode (1)-(5) den Sättigungswert $k_0 = k_c$ des Fermiimpulses nehmen[54].

B2) Zur Unabhängigkeit der Oberflächen-und Krümmungsspannung von der speziellen Definition der Energiedichte.

a) Dichte der kinetischen Energie.

Für endliche Kerne ergibt die $\int d\vec{r}^{\,3}$ -Integration von

$$(1) \qquad \eta_{kin}(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \vec{r}'^2} n(\vec{r}', \vec{r}'')\Big|_{\vec{r}'=\vec{r}''=\vec{r}}$$

dasselbe Ergebnis wie

$$(2) \qquad \hat{\eta}_{kin}(\vec{r}) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial}{\partial \vec{r}'} \frac{\partial}{\partial \vec{r}''} n(\vec{r}', \vec{r}'')\Big|_{\vec{r}'=\vec{r}''=\vec{r}} .$$

Wir wollen fragen, ob dies auch für die eindimensionalen Integrale zutrifft, die in Oberflächenspannung und Krümmungsspannung auszuwerten sind. Hierzu müssen wir den Ausdruck

$$(3) \qquad \int_{-L}^{\infty} dz \left[\hat{\eta}_{kin}(z) - \eta_{kin}(z)\right] = \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-L}^{\infty} dz \left[\frac{\partial}{\partial \vec{r}''} \frac{\partial}{\partial \vec{r}'} + \frac{\partial^2}{\partial \vec{r}_\perp^{\,2}}\right] n(\vec{r}', \vec{r}'')\Big|_{\vec{r}'=\vec{r}''=z\vec{e}_z}$$

betrachten, der den Unterschied zwischen der Oberflächenspannung nach der neuen Definition $\hat{\eta}_{kin}$ und der alten Definition η_{kin} beschreibt. (Offenbar ist im Kerninnern $\hat{\eta}_{okin} = \eta_{okin}$.) Für die Dichtematrix der ebenen Oberfläche (2.13) ist

$$(4) \qquad \left[\frac{\partial}{\partial \vec{r}_\perp'} \frac{\partial}{\partial \vec{r}_\perp''} + \frac{\partial^2}{\partial \vec{r}_\perp^{\,2}}\right] n(\vec{r}', \vec{r}'')\Big|_{\vec{r}'=\vec{r}''=z\vec{e}_z} = 0 .$$

Die verbleibende z Abhängigkeit läßt sich wegen der Identität

$$(5) \qquad \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{\partial}{\partial z'} n(\vec{r}', \vec{r}'')\Big|_{\vec{r}'=\vec{r}''=z\vec{e}_z}\right] = \left[\frac{\partial^2}{\partial z'^2} + \frac{\partial}{\partial z''} \frac{\partial}{\partial z'}\right] n(\vec{r}', \vec{r}'')\Big|_{\vec{r}'=\vec{r}''=z\vec{e}_z}$$

einfach integrieren

(6) $$\lim_{L\to\infty} \int_{-L}^{L} dz \left[\hat{\eta}_{kin}(z) - \eta_{kin}(z)\right] = -\lim_{L\to\infty} \frac{\partial}{\partial z'} n(\vec{r}',\vec{r}'')\Big|_{\vec{r}'=\vec{r}''=-L\vec{e}_z}$$
$$= -\frac{\partial}{\partial \xi} \tilde{n}(\vec{\xi})\Big|_{\vec{\xi}=\vec{0}} = 0 \quad ,$$

wobei für hinreichend großes L die Kernmaterie-Dichtematrix benutzt werden kann.

Im Fall der Krümmungsspannung haben wir den Ausdruck

(7) $$\int dz\, z \left[\hat{\eta}_{kin}(z) - \eta_{kin}(z)\right] + \int dz \left[\hat{\eta}_{1kin}(z) - \eta_{1kin}(z)\right] = \hat{\lambda}_{kin} - \lambda_{kin}$$

zu untersuchen. Mit (5) ergibt sich durch partielle Integration

(8) $$\lim_{L\to\infty} \int_{-L}^{\infty} dz\, z \left[\hat{\eta}_{kin}(z) - \eta_{kin}(z)\right] = -\frac{\hbar^2}{2m} \lim_{L\to\infty} \int_{-L}^{\infty} dz \left[\frac{\partial}{\partial z'} n(\vec{r}',\vec{r}'')\right]_{\vec{r}'=\vec{r}''=z\vec{e}_z} .$$

Der Randteil bei $z=-L$ verschwindet wie in (6). Zur Berechnung von $\hat{\eta}_{1kin}$ müssen wir $\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial \vec{r}'}\frac{\partial}{\partial \vec{r}''}$ auf die Variation $\delta_1 n(\vec{r}',\vec{r}'')$ der Dichtematrix in Gleichung (3.17a) für $\vec{r}'=\vec{r}''=z\vec{e}_z$ (also $\vec{r}_\perp' = \vec{r}_\perp'' = \vec{0}$) anwenden. Wir finden

(9) $$\hat{\eta}_{1kin}(z) = 0 \quad .$$

Damit ergibt sich für $\hat{\lambda}_0 - \lambda_0$ aus (7)

(10) $$\hat{\lambda}_0 - \lambda_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \int dz \left[\frac{\partial}{\partial z'} n(\vec{r}',\vec{r}'')\right]_{\vec{r}'=\vec{r}''=z\vec{e}_z} - \int dz\, \eta_{1kin}(z) = 0$$

wegen (3.18).

b) Dichte der potentiellen Energie.

Anstelle des Ausdrucks

(11) $$\eta_{pot}(\vec{r}) = \frac{1}{2} \int d\vec{\xi}^3 \int d\vec{r}'^3\, \tilde{n}(\vec{r}, -\vec{\xi})\, \tilde{n}(\vec{r}', \vec{\xi})\, \hat{U}(\vec{r}-\vec{r}', 2\vec{\xi}) \quad ,$$

in welchem $\vec{r}$ den Schwerpunktsvektor der ersten Dichtematrix kennzeichnet, könnte man etwa auch

$$(12)\qquad \hat{\eta}_{pot}(\vec{r}) = \tfrac{1}{2}\int d\vec{\xi}^{\,3}\int d\vec{r}^{\,\prime\,3}\,\tilde{\varkappa}(\vec{r}\pm\tfrac{1}{2}\vec{\xi},-\vec{\xi})\,\tilde{\varkappa}(\vec{r}^{\,\prime},\vec{\xi})\,\hat{U}(\vec{r}\pm\tfrac{1}{2}\vec{\xi}-\vec{r}^{\,\prime},2\vec{\xi})$$

vorschlagen, wobei $\vec{r}$ jetzt das erste Argument $\vec{r}' = (\vec{r}+\tfrac{1}{2}\vec{\xi}) + \tfrac{1}{2}(-\vec{\xi})$ bzw. das zweite Argument $\vec{r}'' = (\vec{r}-\tfrac{1}{2}\vec{\xi}) - \tfrac{1}{2}(-\vec{\xi})$ in der Dichtematrix $\varkappa(\vec{r}',\vec{r}'') = \tilde{\varkappa}(\vec{r}\pm\tfrac{1}{2}\vec{\xi},-\vec{\xi})$ bedeutet. Viel mehr sinnvolle Möglichkeiten hat man aber auch kaum. Statt der Variablen $\vec{r}$ in (11) zum Beispiel die Variable $\vec{\xi}$ offenzulassen, ist deswegen nicht angebracht, weil $\vec{\xi}$ ja auf einen endlichen Bereich $|\vec{\xi}| \le a$ beschränkt ist, der durch die Reichweite a der Nichtlokalität $\vec{r}'-\vec{r}''$ gegeben ist, und daher nichts mit der räumlichen Ausdehnung des betrachteten Kerns zu tun haben kann.

Für die weiteren Überlegungen benutzen wir teilweise statt (12) auch den Ausdruck

$$(12a)\qquad \hat{\eta}_{pot}(\vec{r}) = \tfrac{1}{2}\int d\vec{\xi}^{\,3}\int d\vec{r}^{\,\prime\,3}\,\tilde{\varkappa}(\vec{r}\pm\tfrac{1}{2}\vec{\xi},-\vec{\xi})\,\tilde{\varkappa}(\vec{r}^{\,\prime}\pm\tfrac{1}{2}\vec{\xi},\vec{\xi})\,\hat{U}(\vec{r}-\vec{r}^{\,\prime},2\vec{\xi}),$$

der sich aus (12) durch die Substitution $\vec{r}' = \vec{r}'' \pm \tfrac{1}{2}\vec{\xi}$ (bei festgehaltenem $\vec{\xi}$) ergibt. (Wir haben danach für $\vec{r}''$ wieder $\vec{r}'$ geschrieben.) Die Änderung der Oberflächenspannung durch die Umdefinition (12) der potentiellen Energiedichte ist durch

$$(13)\qquad \hat{\sigma}_{pot} - \sigma_{pot} = \lim_{L\to\infty}\int_{-L}^{\infty} dz\,[\hat{\eta}_{pot}(z) - \eta_{pot}(z)]$$

gegeben. (Offensichtlich ist wieder $\hat{\eta}_{o\,pot} = \eta_{o\,pot}$ im Kerninnern.) Für endliches L können wir die $\int d\vec{\xi}^{\,3}$ - Integration mit der $\int dz$ - Integration vertauschen. Substitution $z'' = z \pm \tfrac{1}{2}\zeta$ im Anteil, der von $\hat{\eta}_{pot}$ herrührt, ergibt dann mit (12)

$$\int_{-L}^{\infty} dz\,[\hat{\eta}_{pot}(z) - \eta_{pot}(z)] =$$

$$(14)\qquad \tfrac{1}{2}\int d\vec{\xi}^{\,3}\,d\vec{r}^{\,\prime\,3}\left\{\int_{-L\pm\frac{1}{2}\zeta}^{\infty} dz'' - \int_{-L}^{\infty} dz''\right\}\tilde{\varkappa}(z''\vec{e}_z,-\vec{\xi})\cdot$$

$$\tilde{\varkappa}(z'\vec{e}_z,\vec{\xi})\,\hat{U}((z''-z')\vec{e}_z-\vec{r}_\perp',2\vec{\xi}) \quad .$$

Beachten wir

$$(15)\qquad \Big\{ \int_{-L\pm\frac{1}{2}\zeta}^{\infty} dz'' \;-\; \int_{-L}^{\infty} dz'' \Big\} \;=\; \int_{-L\pm\frac{1}{2}\zeta}^{-L} dz'' \quad ,$$

so haben wir für hinreichend großes L die Kernmaterie-Dichtematrizen einzusetzen. Umformungen ergeben

$$(16)\qquad \begin{aligned} &\lim_{L\to\infty} \int_{-L}^{\infty} dz \,\big[\hat{\eta}_{pot}(z) - \eta_{pot}(z)\big] = \\ &\lim_{L\to\infty} \tfrac{1}{2} \int d\vec{\xi}^{\,3}\, \tilde{n}(\vec{\xi})^2 \int_{-L\pm\frac{1}{2}\zeta}^{-L} dz'' \int d\vec{r}^{\,\prime 3}\, \hat{U}(z''\vec{e}_z - \vec{r}^{\,\prime}, 2\vec{\xi}) \\ &= \tfrac{1}{2} \int d\vec{\xi}^{\,3}\, \tilde{n}(\vec{\xi})^2 (\mp\tfrac{1}{2}\zeta) \int d\vec{r}^{\,\prime 3} \hat{U}(-\vec{r}^{\,\prime}, 2\vec{\xi}) \;=\; 0 \quad , \end{aligned}$$

denn der letzte Ausdruck verschwindet als $\int d\vec{\xi}^{\,3}$-Integral über eine in $\vec{\xi}$ ungerade Funktion. Dabei haben wir angenommen, daß $\hat{U}(\vec{r}, 2\vec{\xi})$ bei festgehaltenem $\vec{r}$ (wie in der vorliegenden Arbeit) eine gerade Funktion von $\vec{\xi}$ ist (Eine Folgerung z. Bsp. aus den Relationen $\langle \vec{\xi}' | U_{ST} | \vec{\xi}'' \rangle = \langle \vec{\xi}'' | U_{ST} | \vec{\xi}' \rangle^*$, diese impliziert $\langle \vec{\xi}' | U_{ST} | \vec{\xi}'' \rangle = \langle \vec{\xi}'' | U_{ST} | \vec{\xi}' \rangle$ da U_{ST} hermitisch, und $\langle \vec{\xi}' | U_{ST} | \vec{\xi}'' \rangle = \langle -\vec{\xi}' | U_{ST} | -\vec{\xi}'' \rangle$.)

Zur Berechnung der Änderung der Krümmungsspannung

$$(17)\qquad \hat{\lambda}_{pot} - \lambda_{pot} \;=\; \int_{-\infty}^{+\infty} dz\, z \,\big[\hat{\eta}_{pot}(z) - \eta_{pot}(z)\big] + \int_{-\infty}^{+\infty} dz \,\big[\hat{\eta}_{1\,pot}(z) - \eta_{1\,pot}(z)\big]$$

behandeln wir den ersten Anteil wie in (14) bis (16). Für hinreichend großes L wird

$$(18)\qquad \begin{aligned} \int_{-L}^{\infty} dz\; z\,\big[\hat{\eta}_{pot}(z) - \eta_{pot}(z)\big] \;&=\; \tfrac{1}{2} \int d\vec{\xi}^{\,3} d\vec{r}^{\,\prime 3} \Big\{ \int_{-L\pm\frac{1}{2}\zeta}^{\infty} dz''(z'' \mp \tfrac{1}{2}\zeta) - \int_{-L}^{\infty} dz'' z'' \Big\} \\ &\cdot \tilde{n}(z''\vec{e}_z, -\vec{\xi})\, \tilde{n}(z''\vec{e}_z, \vec{\xi})\, \hat{U}\big((z''-z')\vec{e}_z - \vec{r}^{\,\prime}, 2\vec{\xi}\big) \\ &=\; \tfrac{1}{2} \int d\vec{\xi}^{\,3}\, \tilde{n}(\vec{\xi})^2 \cdot \tfrac{1}{2} z''^2 \Big|_{z''=-L\pm\frac{1}{2}\zeta}^{z''=-L} \int d\vec{r}^{\,\prime 3}\, \hat{U}(-\vec{r}^{\,\prime}, 2\vec{\xi}) \\ &+\; \tfrac{1}{2} \int d\vec{\xi}^{\,3} d\vec{r}^{\,\prime 3} (\mp\tfrac{1}{2})\zeta \int_{-L\pm\frac{1}{2}\zeta}^{\infty} dz''\, \tilde{n}(z''\vec{e}_z, -\vec{\xi})\, \tilde{n}(z''\vec{e}_z, \vec{\xi})\, \hat{U}(z''\vec{e}_z - \vec{r}^{\,\prime}, 2\vec{\xi}) \quad . \end{aligned}$$

Wir brauchen nur den in $\vec{\xi}$ geraden Anteil des $\int d\vec{\xi}^{\,3}$ -Integranden zu berücksichtigen und finden

$$(19)\qquad -\int_{-\infty}^{+\infty} dz\, z\,[\hat{\eta}_{pot}(z) - \eta_{pot}(z)] = \frac{1}{2}\int d\vec{\xi}^{\,3}\,\tilde{n}(\vec{\xi})^2\,\frac{1}{8}\,\zeta^2 \int d\vec{r}^{\,\prime 3}\,\hat{U}(-\vec{r}^{\,\prime}, z\vec{\xi})\ .$$

Zur Berechnung des zweiten Anteils von $\hat{\lambda}_{pot} - \lambda_{pot}$ in (17) benutzen wir $\hat{\eta}_{pot}$ zweckmäßigerweise in der Form (12a). Aus der Relation (3.17b) in Kapitel 3 folgt zunächst (für beliebiges $\vec{r}, \vec{\xi}$)

$$(20)\qquad \delta_1 \tilde{n}(\vec{r} \pm \tfrac{1}{2}\vec{\xi}, \vec{\xi}) = z\,[\tilde{m}_a(\vec{r}, \vec{\xi}) + \tilde{m}_b(\vec{r}, \vec{\xi})] + \dots\ ,$$

$$(21)\qquad \tilde{m}_a(\vec{r}, \vec{\xi}) = \Big\{ \tfrac{1}{4}(\vec{r}_\perp^{\,2} + \tfrac{1}{4}\vec{\xi}_\perp^{\,2})\frac{\partial}{\partial z''} + \tfrac{1}{2}\vec{r}_\perp \vec{\xi}_\perp \frac{\partial}{\partial \zeta''} - \tfrac{1}{2}\zeta \vec{r}_\perp \frac{\partial}{\partial \vec{\xi}_\perp''} \Big\} \tilde{n}(z''\vec{e}_z, \vec{\xi}'')\Big|_{\substack{z''=z\pm\frac{1}{2}\zeta \\ \vec{\xi}''=\vec{\xi}}}\ ,$$

$$(22)\qquad \tilde{m}_b(\vec{r}, \vec{\xi}) = \Big\{ \tfrac{1}{4}(\pm\vec{r}_\perp \vec{\xi}_\perp + \tfrac{1}{4}\vec{\xi}_\perp^{\,2})\frac{\partial}{\partial z''} + \tfrac{1}{4}(\pm\vec{\xi}_\perp^{\,2})\frac{\partial}{\partial \zeta''} - \tfrac{1}{4}\zeta \vec{\xi}_\perp \frac{\partial}{\partial \vec{\xi}_\perp''} \Big\} \tilde{n}(z''\vec{e}_z, \vec{\xi}'')\Big|_{\substack{z''=z\pm\frac{1}{2}\zeta \\ \vec{\xi}''=\vec{\xi}}}\ .$$

Hierbei haben wir die in ι linearen Terme gleich weggelassen, da sie wegen der Zylindersymmetrie der ebenen Dichtematrix um die z -Achse keinen Beitrag liefern. In (20) bis (22) haben wir die Aufteilung in $\tilde{m}_a$ und $\tilde{m}_b$ gerade so gewählt, daß (mit $\iota = \sigma$)

$$(23)\qquad \delta_1 \tilde{n}(\vec{r}, \vec{\xi}) = z\,\tilde{m}_a(\vec{r} \mp \tfrac{1}{2}\zeta\vec{e}_z, \vec{\xi})$$

gilt. Wir werden also die Beiträge von $\tilde{m}_a$ zu $\hat{\bar{\eta}}_{1\,pot}$ mit $\bar{\eta}_{1\,pot}$ zusammenfassen und erhalten

$$(24)\qquad -\int_{-L}^{\infty} dz\,[\hat{\bar{\eta}}_{1\,pot}(z) - \bar{\eta}_{1\,pot}(z)] = \int d\vec{\xi}^{\,3}\Big\{\int_{-L\pm\frac{1}{2}\zeta}^{\infty} dz - \int_{-L}^{\infty} dz\Big\}\,\bar{\eta}_{1\,pot}(z, \vec{\xi}) + \int d\vec{\xi}^{\,3}\int_{-L\pm\frac{1}{2}\zeta}^{\infty} dz\,\nu(z, \vec{\xi})\ ,$$

$$\bar{\eta}_{1\,rot}(z,\vec{\xi}) = \frac{1}{2}\int d\vec{r}'^3\,\hat{U}(-\vec{r}',2\vec{\xi})\,\Big\{\frac{1}{4}\,\vec{\xi}_\perp^{\,2}\frac{\partial}{\partial z}\,[\tilde{n}(z,\vec{\xi})\tilde{n}(z+z',\vec{\xi})]$$

(25)
$$+\,\tilde{n}(z,\vec{\xi})\cdot\Big(\frac{1}{4}\,\vec{r}_\perp'^{\,2}\frac{\partial}{\partial z'} + \frac{1}{2}\,\vec{r}_\perp'\,\vec{\xi}_\perp\frac{\partial}{\partial\zeta}$$
$$-\,\frac{1}{2}\,\zeta\,\vec{r}_\perp'\frac{\partial}{\partial\vec{\xi}_\perp}\Big)\,\tilde{n}(z+z',\vec{\xi})\quad,$$

$$\nu(z,\vec{\xi}) = \frac{1}{2}\int d\vec{r}'^3\,\hat{U}(-\vec{r}',2\vec{\xi})\,\Big\{\frac{1}{4}\,\vec{\xi}_\perp^{\,2}\frac{\partial}{\partial z}\,[\tilde{n}(z,\vec{\xi})\,\tilde{n}(z+z',\vec{\xi})]$$

(26)
$$+\,\tilde{n}(z,\vec{\xi})\,(\pm\tfrac{1}{4})\,\vec{r}_\perp'\,\vec{\xi}_\perp\frac{\partial}{\partial z}\,\tilde{n}(z+z',\vec{\xi}) + \Big[\frac{1}{4}\,(\pm\vec{\xi}_\perp^{\,2})\frac{\partial}{\partial\zeta}$$
$$-\,\frac{1}{4}\,\zeta\,\vec{\xi}_\perp\frac{\partial}{\partial\vec{\xi}_\perp}\Big]\,[\tilde{n}(z,\vec{\xi})\,\tilde{n}(z+z',\vec{\xi})]\,\Big\}\quad.$$

Wie in (15) und (16) haben wir in $\bar{\eta}_{1\,rot}(z,\vec{\xi})$ für hinreichend großes L wieder die Kernmaterie-Dichtematrix $\tilde{n}(\vec{\xi})$ einzusetzen. Hierfür verschwindet aber $\bar{\eta}_{1\,rot}(z,\vec{\xi})$, denn erstens hängt die Kernmaterie-Dichtematrix nicht mehr vom Schwerpunkt z ab, so daß die Differentiationen nach z und z' verschwinden. Zweitens ist für die Kernmaterie-Dichtematrix

(27)
$$\Big(\vec{\xi}_\perp\frac{\partial}{\partial\zeta} - \zeta\frac{\partial}{\partial\vec{\xi}_\perp}\Big)\,\tilde{n}(\vec{\xi}) = \vec{0}\quad,$$

da $\tilde{n}(\vec{\xi})$ nur vom Betrag von $\vec{\xi}$ abhängt. Für die Auswertung des Integrals über $\nu(z,\vec{\xi})$ bemerken wir, daß auch $\nu(z,\vec{\xi})$ für $z\to-\infty$ verschwindet wegen der eben erwähnten Eigenschaften der Kernmaterie-Dichtematrix. Wir können also

(28)
$$\int d\vec{\xi}^{\,3}\int_{-L\pm\frac{1}{4}\zeta}^{\infty}dz\;\nu(z,\vec{\xi}) = \int_{-L}^{\infty}dz\int d\vec{\xi}^{\,3}\,\nu(z,\vec{\xi})$$

setzen. Wegen der Zylindersymmetrie der Dichtematrix um die z-Achse gilt

(29)
$$\tilde{n}(z,\vec{\xi}_\perp+\zeta\vec{e}_z) = \tilde{n}(z,-\vec{\xi}_\perp+\zeta\vec{e}_z)\quad,$$

außerdem setzen wir $\tilde{n}(z,\vec{\xi})$ als (reell und) eine gerade Funktion

von $\vec{\xi}$ voraus. Daher sind die letzten Terme in der geschweiften Klammer ungerade in $\vec{\xi}$, so daß von der $\int d\vec{\xi}^3$-Integration nur

$$(30)\qquad \int d\vec{\xi}^3\, \nu(z,\vec{\xi}) = \frac{\partial}{\partial z}\,\frac{1}{2}\int d\vec{\xi}^3 \int d\vec{r}'^3\, \hat{u}(-\vec{r}', 2\vec{\xi})\,\frac{1}{4}\,\vec{\xi}_\perp^2\, \tilde{n}(z,\vec{\xi})\,\tilde{n}(z+z',\vec{\xi})$$

übrig bleibt. Für den in (24) zu berechnenden Ausdruck finden wir also

$$(31)\qquad \int_{-\infty}^{+\infty} dz\, [\hat{\bar{\eta}}_{1,Pot}(z) - \bar{\eta}_{1,Pot}(z)] = -\frac{1}{2}\int d\vec{\xi}^3 \int d\vec{r}'^3\, \tilde{n}(\vec{\xi})^2\,\frac{1}{4}\,\vec{\xi}_\perp^2\,\hat{u}(-\vec{r}', 2\vec{\xi})\ .$$

Dies ist aber gerade das Negative von (19), da die Größe $f(\vec{\xi}) = \tilde{n}(\vec{\xi})^2 \int d\vec{r}'^3\, \hat{u}(-\vec{r}', 2\vec{\xi})$ nur vom Betrag von $\vec{\xi}$ abhängt. Damit haben wir gezeigt, daß $\hat{\lambda}_{Pot} - \lambda_{Pot} = \sigma$ in (17) ist, d.h. die Krümmungsspannung ändert sich nicht durch die Umdefinition (12).

Die Tabellen

Auf den folgenden Seiten findet man in

Tabelle 1: Ein Verzeichnis der Eingabeparameter.

Tabelle 2: Die Dicke a_c des Einteilchenpotentialabfalls und die Lage z_c der Kernoberfläche bei gegebener Kastenreichweite a_1 .

Tabelle 3: Das Zahlenmaterial zur Bestimmung der Kraftkonstanten W_1 und W_2 , zur Auswertung der Ableitung ν_k der spezifischen Oberflächenenergie β_0 nach dem Fermiimpuls k_0 und zur Berechnung der spezifischen Krümmungsenergie γ_c .

Tabelle 4: Die Kraftkonstanten V_1, V_2 und W_1, W_2 in Abhängigkeit von der Kastenreichweite a_1 .

Tabelle 5: Die Kompressibilität c , die spezifische Krümmungsenergie γ_c und die Ableitung ν_k der spezifischen Oberflächenenergie β_0 nach dem Fermiimpuls k_0 in Abhängigkeit von der Kastenreichweite a_1 .

Tabelle 6: Die Kraftkonstanten W_1 und W_2 , die spezifische Krümmungsenergie γ_c , die Ableitung ν_k der spezifischen Oberflächenenergie β_0 nach dem Fermiimpuls k_0 , die spezifische Komprimierungsenergie $\varkappa_c$ und die spezifische $A^{1/3}$ - Energie $\tilde{\gamma}_c$ (für sphärische Kerngestalt) in Abhängigkeit von der Kastenreichweite a_1 für einen speziellen Wert $\beta_{c\,exp}$ für die spezifische Oberflächenenergie β_c .

Tabelle 7: Die Aufteilung der spezifischen Krümmungsenergie γ_c in ihren analytisch auswertbaren Anteil $\gamma_c^{(I)}$ und ihren i.a. nicht analytisch angebbaren Anteil $\gamma_c^{(II)}$ sowie die Zusammensetzung von γ_c aus dem Beitrag $\gamma_c^{(1,2)}$, der von den Kraftkonstanten W_1 und W_2 abhängt, und dem Beitrag $\gamma_c^{(3)}$, der nicht von W_1 und W_2 abhängt, bei gegebener Kastenreichweite a_1 und einer speziellen Wahl für die spezifische Oberflächenenergie β_c .

Tabelle 1

Eingabeparameter			entnommen aus
r_c	1.120	f	H.R.Collard et.al.[49] (Landolt-Börnstein)
n_c	0.170	f^{-3}	
k_c	1.360	f^{-1}	
t_c	2.30	f	
α_c	-15.7	MeV	P.A.Seeger et.al.[50], W.D.Myers et.al.[6,19]
$\frac{\hbar^2}{2m}$	20.7336	MeV f^2	G.Süßmann[51] +)

+) Es wurde folgender Mittelwert gewählt:

$$\frac{\hbar^2}{2m} = \frac{1}{2}\left(\frac{\hbar^2}{2m_p} + \frac{\hbar^2}{2m_n}\right)$$

$$\frac{\hbar^2}{2m_p} = 20.7479 \text{ MeV } f^2 ,$$

$$m_n = 1.0086654 \text{ u} , \quad m_n - m_p = 1.3888 \text{ mu} .$$

Verschiedene Werte für β_c :

β_c [MeV]	aus
17.8	A.E.S.Green[52]
17.94	W.D.Myers et.al.[53]
18.56	W.D.Myers et.al.[6,19]
19.5	P.A.Seeger et.al.[50]

Tabelle 2

a_1 [f]	a_c [f]	z_c [f]
0.7	0.5970	-1.0379
0.8	0.5957	-1.0350
0.9	0.5943	-1.0321
1.0	0.5930	-1.0292
1.1	0.5914	-1.0259
1.2	0.5900	-1.0229
1.3	0.5893	-1.0213
2.1	0.5920	-1.0271
2.2	0.5839	-1.0100

Tabelle 3 (Seite 111 bis 119)

Erläuterungen:

Jede der folgenden neun Seiten gehört zu jeweils einem Wert der (kürzeren) Kastenlänge a_1 , und zwar ist a_1 die oberste Zahl jeder Seite (in f). Die folgende Zeile enthält drei Zahlen z_1, z_2, z_3 . Diese Zahlen ergeben den analytisch auswertbaren Anteil der Krümmungsenergie γ_c nach der Formel $8\pi r_c \int dz\, \overline{\eta}_1(z) = W_1 z_1 + W_2 z_2 + z_3$ (in MeV), wobei W_1 und W_2 die aus den weiter unten stehenden Zahlen zu berechnenden Kraftkonstanten sind. Das weitere Zahlenmaterial besteht aus neun Blöcken zu jeweils drei Zeilen. In der ersten Zeile jedes Blocks stehen zwei Eingangsgrössen, und zwar bedeutet die erste Zahl die Einteilchenpotentialdicke a_0 in f , die zweite Zahl den Fermiimpuls k_0 in f^{-1} . Die zweite Zeile enthält drei Zahlen x_1, x_2, x_3 , aus denen sich die spezifische Oberflächenenergie ($A^{2/3}$ -Koeffizient) berechnet zu $\beta_0 = W_1 x_1 + W_2 x_2 + x_3$ (in MeV). Die dritte Zeile enthält drei Zahlen y_1, y_2, y_3 . Sie ergeben den nur numerisch auswertbaren Anteil $8\pi r_0 \int dz\, (z - z_0)\left[\eta(z) - \frac{\gamma_0}{n_0} n(z)\right] = W_1 y_1 + W_2 y_2 + y_3$ der Krümmungsenergie γ_0 in MeV . Von diesen jeweils drei Zahlen y_1, y_2, y_3 ist nur das Tripel im dritten Block ($a_0 = a_c, k_0 = k_c$) wichtig.

Die ersten fünf Zahlenblöcke (a_0 variiert, k_0 fest) dienen mit den Zahlen x_1, x_2, x_3 zur Bestimmung von W_1 und W_2 durch das Gleichungssystem (6.3). Die letzten vier Zahlenblöcke (a_0 fest, k_0 variiert) dienen zur Bestimmung der Ableitung $\nu_k = W_1 \frac{\partial \beta_{0(1)}}{\partial k_0} + W_2 \frac{\partial \beta_{0(2)}}{\partial k_0} + \frac{\partial \beta_{0(3)}}{\partial k_0}$, vgl. Gleichung (6.4).

```
A1:          0.70000000E+00

Z1,Z2,Z3:    0.76864447E-03  0.10475887E-01  0.10543245E+03


AN,KN:       0.49701140E+00  0.13600330E+01
X1,X2,X3:   -0.56131192E-03 -0.75362108E-02 -0.38984000E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.80391707E-03 -0.10845290E-01 -0.50641570E+02

AN,KN:       0.54701141E+00  0.13600330E+01
X1,X2,X3:   -0.58603793E-03 -0.78754205E-02 -0.41407509E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.79678948E-03 -0.10759532E-01 -0.51151292E+02

AN,KN:       0.59701140E+00  0.13600330E+01
X1,X2,X3:   -0.60812021E-03 -0.81859989E-02 -0.43741107E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.79001133E-03 -0.10684081E-01 -0.51823544E+02

AN,KN:       0.64701141E+00  0.13600330E+01
X1,X2,X3:   -0.62880497E-03 -0.84663469E-02 -0.46003308E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.78482174E-03 -0.10617306E-01 -0.52651179E+02

AN,KN:       0.69701140E+00  0.13600330E+01
X1,X2,X3:   -0.64766105E-03 -0.87161358E-02 -0.48215497E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.78068929E-03 -0.10557363E-01 -0.53631524E+02


AN,KN:       0.59701140E+00  0.13200330E+01
X1,X2,X3:   -0.50105031E-03 -0.68071710E-02 -0.40393854E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.64476001E-03 -0.88008387E-02 -0.46376598E+02

AN,KN:       0.59701140E+00  0.13400330E+01
X1,X2,X3:   -0.55214310E-03 -0.74710307E-02 -0.42082186E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.71387804E-03 -0.97036672E-02 -0.49042229E+02

AN,KN:       0.59701140E+00  0.13800330E+01
X1,X2,X3:   -0.66950693E-03 -0.89533529E-02 -0.45292405E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.87393727E-03 -0.11746487E-01 -0.54746289E+02

AN,KN:       0.59701140E+00  0.14000330E+01
X1,X2,X3:   -0.73518074E-03 -0.97782576E-02 -0.46843055E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.96484522E-03 -0.12899717E-01 -0.57799852E+02
```

```
A1:          0.80000000E+00

Z1,Z2,Z3:    0.12895231E-02  0.16776043E-01  0.10540067E+03



AN,KN:       0.49566030E+00  0.13600330E+01
X1,X2,X3:   -0.93660271E-03 -0.12039011E-01 -0.39126553E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.13438409E-02 -0.17339472E-01 -0.50765157E+02

AN,KN:       0.54566029E+00  0.13600330E+01
X1,X2,X3:   -0.97927566E-03 -0.12571281E-01 -0.41577194E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.13331668E-02 -0.17197592E-01 -0.51315039E+02

AN,KN:       0.59566031E+00  0.13600330E+01
X1,X2,X3:   -0.10177563E-02 -0.13055778E-01 -0.43939404E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.13233058E-02 -0.17068786E-01 -0.52026687E+02

AN,KN:       0.64566030E+00  0.13600330E+01
X1,X2,X3:   -0.10525382E-02 -0.13493516E-01 -0.46234392E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.13147521E-02 -0.16954111E-01 -0.52897272E+02

AN,KN:       0.69566030E+00  0.13600330E+01
X1,X2,X3:   -0.10833855E-02 -0.13885735E-01 -0.48481617E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.13070696E-02 -0.16852598E-01 -0.53921604E+02



AN,KN:       0.59566031E+00  0.13200330E+01
X1,X2,X3:   -0.83906227E-03 -0.10890412E-01 -0.40769109E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.10806766E-02 -0.14104727E-01 -0.46754685E+02

AN,KN:       0.59566031E+00  0.13400330E+01
X1,X2,X3:   -0.92478637E-03 -0.11933557E-01 -0.42368941E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.11966203E-02 -0.15526932E-01 -0.49334653E+02

AN,KN:       0.59566031E+00  0.13800330E+01
X1,X2,X3:   -0.11184210E-02 -0.14261609E-01 -0.45465766E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.14615987E-02 -0.18739278E-01 -0.54835799E+02

AN,KN:       0.59566031E+00  0.14000330E+01
X1,X2,X3:   -0.12272567E-02 -0.15555834E-01 -0.46936674E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.16124513E-02 -0.20548309E-01 -0.57774135E+02
```

```
A1:          0.90000000E+00

Z1,Z2,Z3:    0.20270232E-02  0.25053214E-01  0.10549240E+03


AN,KN:       0.49427140E+00  0.13600330E+01
X1,X2,X3:   -0.14696737E-02 -0.17895248E-01 -0.39456305E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.21101736E-02 -0.25810731E-01 -0.51093052E+02

AN,KN:       0.54427140E+00  0.13600330E+01
X1,X2,X3:   -0.15361869E-02 -0.18679557E-01 -0.41929109E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.20930195E-02 -0.25599269E-01 -0.51678143E+02

AN,KN:       0.59427141E+00  0.13600330E+01
X1,X2,X3:   -0.15967014E-02 -0.19395132E-01 -0.44316939E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.20776840E-02 -0.25407382E-01 -0.52426875E+02

AN,KN:       0.64427140E+00  0.13600330E+01
X1,X2,X3:   -0.16509963E-02 -0.20042240E-01 -0.46642498E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.20639505E-02 -0.25235608E-01 -0.53338642E+02

AN,KN:       0.69427140E+00  0.13600330E+01
X1,X2,X3:   -0.16997416E-02 -0.20623411E-01 -0.48926656E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.20521780E-02 -0.25083482E-01 -0.54409952E+02


AN,KN:       0.59427141E+00  0.13200330E+01
X1,X2,X3:   -0.13178734E-02 -0.16239471E-01 -0.41310866E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.16985934E-02 -0.21074017E-01 -0.47311736E+02

AN,KN:       0.59427141E+00  0.13400330E+01
X1,X2,X3:   -0.14516920E-02 -0.17761608E-01 -0.42832018E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.18798475E-02 -0.23156127E-01 -0.49819392E+02

AN,KN:       0.59427141E+00  0.13800330E+01
X1,X2,X3:   -0.17534475E-02 -0.21145954E-01 -0.45748752E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.22932473E-02 -0.27839440E-01 -0.55138361E+02

AN,KN:       0.59427141E+00  0.14000330E+01
X1,X2,X3:   -0.19228946E-02 -0.23020377E-01 -0.47114101E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.25281907E-02 -0.30465190E-01 -0.57960436E+02
```

```
A1:          0.10000000E+01

Z1,Z2,Z3:    0.30254972E-02  0.35380946E-01  0.10576033E+03


AN,KN:       0.49295700E+00  0.13600330E+01
X1,X2,X3:   -0.21893067E-02 -0.25146404E-01 -0.39949272E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.31457031E-02 -0.36320379E-01 -0.51578397E+02

AN,KN:       0.54295700E+00  0.13600330E+01
X1,X2,X3:   -0.22878668E-02 -0.26238904E-01 -0.42455392E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.31197242E-02 -0.36024235E-01 -0.52206653E+02

AN,KN:       0.59295701E+00  0.13600330E+01
X1,X2,X3:   -0.23781514E-02 -0.27237878E-01 -0.44881669E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.30970526E-02 -0.35755209E-01 -0.53002264E+02

AN,KN:       0.64295700E+00  0.13600330E+01
X1,X2,X3:   -0.24591780E-02 -0.28142306E-01 -0.47251051E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.30767218E-02 -0.35513115E-01 -0.53965584E+02

AN,KN:       0.69295701E+00  0.13600330E+01
X1,X2,X3:   -0.25317092E-02 -0.28955621E-01 -0.49583963E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.30590321E-02 -0.35297522E-01 -0.55093048E+02


AN,KN:       0.59295701E+00  0.13200330E+01
X1,X2,X3:   -0.19650705E-02 -0.22896154E-01 -0.42029652E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.25347691E-02 -0.29773533E-01 -0.48038776E+02

AN,KN:       0.59295701E+00  0.13400330E+01
X1,X2,X3:   -0.21635507E-02 -0.24993212E-01 -0.43479605E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.28039158E-02 -0.32651915E-01 -0.50477745E+02

AN,KN:       0.59295701E+00  0.13800330E+01
X1,X2,X3:   -0.26098805E-02 -0.29637536E-01 -0.46222687E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.34160173E-02 -0.39097917E-01 -0.55615740E+02

AN,KN:       0.59295701E+00  0.14000330E+01
X1,X2,X3:   -0.28596118E-02 -0.32199597E-01 -0.47487833E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.37626055E-02 -0.42695209E-01 -0.58321085E+02
```

```
A1:          0.11000000E+01

Z1,Z2,Z3:    0.43289046E-02  0.47736119E-01  0.10626467E+03



AN,KN:       0.49140150E+00  0.13600330E+01
X1,X2,X3:   -0.31279676E-02 -0.33759684E-01 -0.40651347E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.44972488E-02 -0.48827719E-01 -0.52293807E+02

AN,KN:       0.54140151E+00  0.13600330E+01
X1,X2,X3:   -0.32686869E-02 -0.35212056E-01 -0.43195131E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.44602948E-02 -0.48432487E-01 -0.52966822E+02

AN,KN:       0.59140150E+00  0.13600330E+01
X1,X2,X3:   -0.33964477E-02 -0.36541209E-01 -0.45662883E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.44268173E-02 -0.48070865E-01 -0.53810292E+02

AN,KN:       0.64140150E+00  0.13600330E+01
X1,X2,X3:   -0.35116323E-02 -0.37746735E-01 -0.48078990E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.43972355E-02 -0.47744157E-01 -0.54826491E+02

AN,KN:       0.69140150E+00  0.13600330E+01
X1,X2,X3:   -0.36147653E-02 -0.38832726E-01 -0.50465126E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.43714251E-02 -0.47451952E-02 -0.56013349E+02



AN,KN:       0.59140150E+00  0.13200330E+01
X1,X2,X3:   -0.28100150E-02 -0.30839732E-01 -0.42942279E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.36275679E-02 -0.40189147E-01 -0.48972013E+02

AN,KN:       0.59140150E+00  0.13400330E+01
X1,X2,X3:   -0.30917397E-02 -0.33596739E-01 -0.44330175E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.40101999E-02 -0.43986954E-01 -0.51354025E+02

AN,KN:       0.59140150E+00  0.13800330E+01
X1,X2,X3:   -0.37256823E-02 -0.39681807E-01 -0.46927112E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.48800584E-02 -0.52457821E-01 -0.56341903E+02

AN,KN:       0.59140150E+00  0.14000330E+01
X1,X2,X3:   -0.40811238E-02 -0.43027562E-01 -0.48109679E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.53727900E-02 -0.57165607E-01 -0.58951283E+02
```

```
A1:          0.12000000E+01

Z1,Z2,Z3:    0.59795314E-02  0.62014640E-01  0.10707219E+03



AN,KN:       0.49000690E+00  0.13600330E+01
X1,X2,X3:   -0.43113004E-02 -0.43633083E-01 -0.41621476E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.62036582E-02 -0.63189974E-01 -0.53299088E+02

AN,KN:       0.54000691E+00  0.13600330E+01
X1,X2,X3:   -0.45046144E-02 -0.45491593E-01 -0.44193667E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.61523663E-02 -0.62684827E-01 -0.54003570E+02

AN,KN:       0.59000690E+00  0.13600330E+01
X1,X2,X3:   -0.46805096E-02 -0.47195340E-01 -0.46693355E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.61061504E-02 -0.62220449E-01 -0.54882196E+02

AN,KN:       0.64000690E+00  0.13600330E+01
X1,X2,X3:   -0.48317683E-02 -0.48742743E-01 -0.49144978E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.60652675E-02 -0.61798292E-01 -0.55937663E+02

AN,KN:       0.69000690E+00  0.13600330E+01
X1,X2,X3:   -0.49812478E-02 -0.50138096E-01 -0.51569867E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.60294779E-02 -0.61417805E-01 -0.57167878E+02

AN,KN:       0.[illegible]  0.13200330E+01
X1,X2,X3:   -0.[illegible] -0.39991675E-01 -0.44071770E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.[illegible] -0.52228047E-01 -0.50133956E+02

AN,KN:       0.[illegible]  0.13400330E+01
X1,X2,X3:   -0.42636422E-02 -0.43479295E-01 -0.45412846E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.55354278E-02 -0.57049521E-01 -0.52475577E+02

AN,KN:       0.59000690E+00  0.[illegible]
X1,X2,X3:   -0.[illegible] -0.[illegible] -0.47902258E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.67261725E-02 -0.67759763E-01 -0.57355458E+02

AN,KN:       0.59000690E+00  0.14000330E+01
X1,X2,X3:   -0.56152676E-02 -0.55351751E-01 -0.49026980E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.73987593E-02 -0.73686779E-01 -0.59896526E+02
```

```
A1:          0.13000000E+01

Z1,Z2,Z3:    0.80167408E-02  0.78056271E-01  0.10825292E+03



AN,KN:       0.48929101E+00  0.13600330E+01
X1,X2,X3:   -0.57680114E-02 -0.54645023E-01 -0.42842801E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.83051218E-02 -0.79220071E-01 -0.54581249E+02

AN,KN:       0.53929101E+00  0.13600330E+01
X1,X2,X3:   -0.60257202E-02 -0.56948508E-01 -0.45459167E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.82361876E-02 -0.78597979E-02 -0.55321223E+02

AN,KN:       0.58929101E+00  0.13600330E+01
X1,X2,X3:   -0.62613430E-02 -0.59064380E-01 -0.47999373E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.81750342E-02 -0.78023801E-01 -0.56238978E+02

AN,KN:       0.63929101E+00  0.13600330E+01
X1,X2,X3:   -0.64748490E-02 -0.60989582E-01 -0.50495083E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.81217282E-02 -0.77499192E-01 -0.57338536E+02

AN,KN:       0.68929102E+00  0.13600330E+01
X1,X2,X3:   -0.66644277E-02 -0.62726942E-01 -0.52965478E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.80733176E-02 -0.77022164E-01 -0.58615780E+02



AN,KN:       0.58929101E+00  0.13200330E+01
X1,X2,X3:   -0.51948378E-02 -0.50241698E-01 -0.45437709E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.67177524E-02 -0.65748197E-01 -0.51540942E+02

AN,KN:       0.58929101E+00  0.13400330E+01
X1,X2,X3:   -0.57072670E-02 -0.54517186E-01 -0.46750668E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.74158810E-02 -0.71678236E-01 -0.53861175E+02

AN,KN:       0.58929101E+00  0.13800330E+01
X1,X2,X3:   -0.68602112E-02 -0.63894092E-01 -0.49175145E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.90000448E-02 -0.84805417E-01 -0.58676974E+02

AN,KN:       0.58929101E+00  0.14000330E+01
X1,X2,X3:   -0.75019807E-02 -0.69013815E-01 -0.50264440E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.98908597E-02 -0.92041066E-01 -0.61173595E+02
```

```
A1:          0.21000000E+01

Z1,Z2,Z3:    0.41309969E-01  0.25213328E+00  0.10471473E+03


AN,KN:       0.49197080E+00  0.13600330E+01
X1,X2,X3:   -0.29287115E-01 -0.17337335E+00 -0.37646069E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.42331647E-01 -0.25102734E+00 -0.50815044E+02

AN,KN:       0.54197080E+00  0.13600330E+01
X1,X2,X3:   -0.30553205E-01 -0.17991991E+00 -0.40060022E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.41987350E-01 -0.24952369E+00 -0.51485609E+02

AN,KN:       0.59197079E+00  0.13600330E+01
X1,X2,X3:   -0.31710703E-01 -0.18600843E+00 -0.42387251E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.41672787E-01 -0.24806245E+00 -0.52324702E+02

AN,KN:       0.64197081E+00  0.13600330E+01
X1,X2,X3:   -0.32759884E-01 -0.19161715E+00 -0.44651243E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.41389437E-01 -0.24665554E+00 -0.53333098E+02

AN,KN:       0.69197080E+00  0.13600330E+01
X1,X2,X3:   -0.33703126E-01 -0.19674271E+00 -0.46871257E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.41135495E-01 -0.24530976E+00 -0.54505865E+02


AN,KN:       0.59197079E+00  0.13200330E+01
X1,X2,X3:   -0.26710912E-01 -0.16084415E+00 -0.39985520E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.34772131E-01 -0.21284267E+00 -0.47463322E+02

AN,KN:       0.59197079E+00 -0.13400330E+01
X1,X2,X3:   -0.29127162E-01 -0.17307640E+00 -0.41225117E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.38094808E-01 -0.22990752E+00 -0.49853374E+02

AN,KN:       0.59197079E+00  0.13800330E+01
X1,X2,X3:   -0.34469362E-01 -0.19966783E+00 -0.43454395E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.45521651E-01 -0.26736617E+00 -0.54880474E+02

AN,KN:       0.59197079E+00  0.14000330E+01
X1,X2,X3:   -0.37412781E-01 -0.21408511E+00 -0.44406548E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.49659416E-01 -0.28788245E+00 -0.57523524E+02
```

```
A1:          0.22000000E+01

Z1,Z2,Z3:    0.47736119E-01  0.27882257E+00  0.75529270E+02



AN,KN:       0.48392980E+00  0.13600330E+01
X1,X2,X3:   -0.33664336E-01 -0.19159059E+00 -0.14751489E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.48767624E-01 -0.27718426E+00 -0.26690134E+02

AN,KN:       0.53392980E+00  0.13600330E+01
X1,X2,X3:   -0.35107178E-01 -0.19865685E+00 -0.17435971E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.48362710E-01 -0.27555884E+00 -0.27897536E+02

AN,KN:       0.58392980E+00  0.13600330E+01
X1,X2,X3:   -0.36428621E-01 -0.20524339E+00 -0.20096075E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.47991967E-01 -0.27396945E+00 -0.29300103E+02

AN,KN:       0.63392980E+00  0.13600330E+01
X1,X2,X3:   -0.37627684E-01 -0.21132341E+00 -0.22746858E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.47656726E-01 -0.27243040E+00 -0.30892323E+02

AN,KN:       0.68392980E+00  0.13600330E+01
X1,X2,X3:   -0.38707820E-01 -0.21688943E+00 -0.25404908E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.47356266E-01 -0.27094919E+00 -0.32668893E+02



AN,KN:       0.58392980E+00  0.13200330E+01
X1,X2,X3:   -0.30786251E-01 -0.17762003E+00 -0.18519203E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.40165931E-01 -0.23530840E+00 -0.25263580E+02

AN,KN:       0.58392980E+00  0.13400330E+01
X1,X2,X3:   -0.33515693E-01 -0.19105140E+00 -0.19332106E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.43935918E-01 -0.25403663E+00 -0.27216386E+02

AN,KN:       0.58392980E+00  0.13800330E+01
X1,X2,X3:   -0.39534501E-01 -0.22022654E+00 -0.20792960E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.52352710E-01 -0.29517358E+00 -0.31521160E+02

AN,KN:       0.58392980E+00  0.14000330E+01
X1,X2,X3:   -0.42841147E-01 -0.23603070E+00 -0.21400239E+02
Y1,Y2,Y3:   -0.57036052E-01 -0.31771863E+00 -0.33885010E+02
```

Tabelle 4

a_1 [f]	V_1 [MeV f^3]	V_2 [MeV f^3]	$W_1^{(0)}$ [MeV f^3]	$W_1^{(1)}$ [f^3]	$W_2^{(0)}$ [MeV f^3]	$W_2^{(1)}$ [f^3]
0.7	.1015257+4	-.2338351+4	.2999+7	-.5860+5	-.2389+6	.4732+4
0.8	.6000518+3	-.1979336+4	.1544+7	-.2990+5	-.1310+6	.2579+4
0.9	.3059479+3	-.1752307+4	.7961+6	-.1526+5	-.7276+5	.1424+4
1.0	.8567133+2	-.1611466+4	.4464+6	-.8464+4	-.4417+5	.8594+3
1.1	-.8771151+2	-.1531592+4	.2639+6	-.4951+4	-.2843+5	.5504+3
1.2	-.2305449+3	-.1498225+4	.1658+6	-.3079+4	-.1950+5	.3759+3
1.3	-.3533431+3	-.1502708+4	.1097+6	-.2017+4	-.1413+5	.2708+3
2.1	-.1595336+4	.1165836+3	.1121+5	-.1920+3	-.2828+4	.5335+2
2.2	-.2146987+4	.2729106+4	.9516+4	-.1561+3	-.2477+4	.4685+2

$$W_i = W_i^{(0)} + \beta_{exp}\, W_i^{(1)} \quad , \qquad i = 1, 2$$

Tabelle 5

a_1 [f]	$c = k_c^2 \mu_c$ [MeV]	$\gamma_c^{(0)}$ [MeV]	$\gamma_c^{(1)}$	$\nu_k^{(0)}$ [MeV f]	$\nu_k^{(1)}$ [f]
0.7	.2320652+3	.39 +2	.27	.111 +3	-.9 -1
0.8	.2121036+3	.40 +2	.26	.115 +3	-.19
0.9	.1907983+3	.39 +2	.27	.112 +3	-.17
1.0	.1687003+3	.37 +2	.28	.111 +3	-.17
1.1	.1464620+3	.36 +2	.30	.106 +3	-.12
1.2	.1248547+3	.35 +2	.31	.102 +3	-.7 -1
1.3	.1047922+3	.34 +2	.33	.98 +2	-.3 -1
2.1	.1609681+3	.37 +2	.29	.41 +2	.114 +1
2.2	.2004059+3	.32 +2	.27	.50 +2	.129 +1

$$\gamma_c = \gamma_c^{(0)} + \beta_{c\,exp}\,\gamma_c^{(1)} \quad , \quad \nu_k = \nu_k^{(0)} + \beta_{c\,exp}\,\nu_k^{(1)}$$

Bsp: $a_1 = 0.9\ f$, $\beta_{c\,exp} = 18.5\ MeV$,

$\gamma_c = (.39+2 + 18.5 * .27)\ MeV = .44+2\ MeV$

Tabelle 6

a_1 [f]	W_1 [MeV f^3]	W_2 [MeV f^3]	γ_c [MeV]	ν_κ [MeV f]	$\varkappa_c$ [MeV]	$\tilde{\gamma}_c$ [MeV]
0.7	.1914+7	-.1514+6	.44 +2	.109 +3	.476 +2	-.4 +1
0.8	.9910+6	-.8333+5	.44 +2	.111 +3	.540 +2	-.10 +2
0.9	.5138+6	-.4642+5	.43 +2	.109 +3	.578 +2	-.15 +2
1.0	.2898+6	-.2827+5	.43 +2	.107 +3	.634 +2	-.20 +2
1.1	.1723+6	-.1825+5	.42 +2	.104 +3	.684 +2	-.26 +2
1.2	.1088+6	-.1255+5	.41 +2	.101 +3	.751 +2	-.34 +2
1.3	.7243+5	-.9116+4	.40 +2	.98 +2	.845 +2	-.45 +2
2.1	.7661+4	-.1841+4	.42 +2	.62 +2	.222 +2	.20 +2
2.2	.6630+4	-.1611+4	.37 +2	.74 +2	.254 +2	.12 +2

$\varkappa_c = \nu_\kappa^2 / 2\mu_c$ $\qquad \tilde{\gamma}_c = \gamma_c - \varkappa_c$ $\qquad \beta_{c\,exp} = 18.5$ MeV

Tabelle 7

a_1 [f]	$\gamma_c^{(I)}$ [MeV]	$\gamma_c^{(II)}$ [MeV]	$\gamma_c^{(1,2)}$ [MeV]	$\gamma_c^{(3)}$ [MeV]	γ_c [MeV]
0.7	-.884 +1	.53 +2	-.10 +2	.536 +2	.44 +2
0.8	-.146 +2	.59 +2	-.9 +1	.534 +2	.44 +2
0.9	-.159 +2	.59 +2	-.10 +2	.531 +2	.43 +2
1.0	-.177 +2	.61 +2	-.10 +2	.528 +2	.43 +2
1.1	-.189 +2	.61 +2	-.11 +2	.525 +2	.42 +2
1.2	-.205 +2	.62 +2	-.11 +2	.522 +2	.41 +2
1.3	-.227 +2	.63 +2	-.12 +2	.521 +2	.40 +2
2.1	-.430 +2	.85 +2	-.10 +2	.524 +2	.42 +2
2.2	-.571 +2	.94 +2	-.5 +2	.543 +2	.37 +2

$$\gamma_c^{(I)} = 8\pi r_c \int dz\, \bar{\eta}_1(z)$$

$$\gamma_c^{(II)} = 8\pi r_c \int dz\, (z - z_c)\,[\eta(z) - (\eta_c/n_c)\, n(z)]$$

$$\gamma_c = \gamma_c^{(I)} + \gamma_c^{(II)} = \gamma_c^{(1,2)} + \gamma_c^{(3)}$$

($\beta_{c\,exp}$ = 18.5 MeV)

Die graphischen Darstellungen

Abbildung 1: Die Energie pro Teilchen in Abhängigkeit vom Fermiimpuls für $a_1 = 0.9\,f$ in Kernmaterie.

Abbildung 2: Die Teilchendichte am Kernrand ($a_1 = 0.9\,f$).

Abbildung 3: Die Energiedichte am Kernrand ($a_1 = 0.9\,f$).

Abbildung 4: Der Verlauf der Dichtedifferenz, deren Integral die Oberflächenspannung ergibt ($a_1 = 0.9\,f$).

Abbildung 5: Der von der Kraftkonstanten W_1 abhängige Anteil der Dichtedifferenz aus Abb.4.

Abbildung 6: Der von der Kraftkonstanten W_2 abhängige Anteil der Dichtedifferenz aus Abb.4.

Abbildung 7: Der von den Kraftkonstanten W_1 und W_2 unabhängige Anteil der Dichtedifferenz aus Abb.4.

Abbildung 8: Die spezifische $A^{1/3}$ - Energie in Abhängigkeit von der Kastenreichweite a_1 .

Abbildung 9: Die Kompressibilität von Kernmaterie in Abhängigkeit von der Kastenreichweite a_1 .

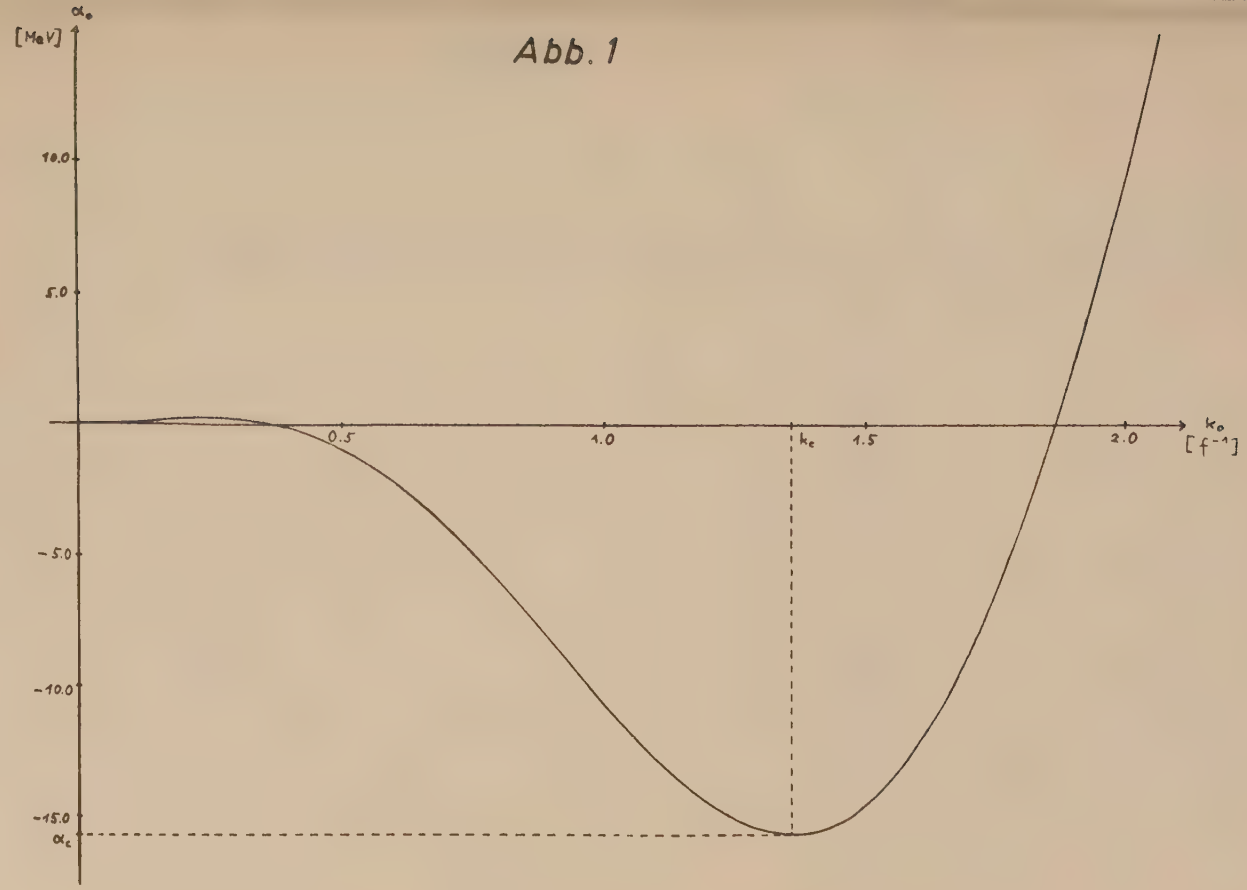
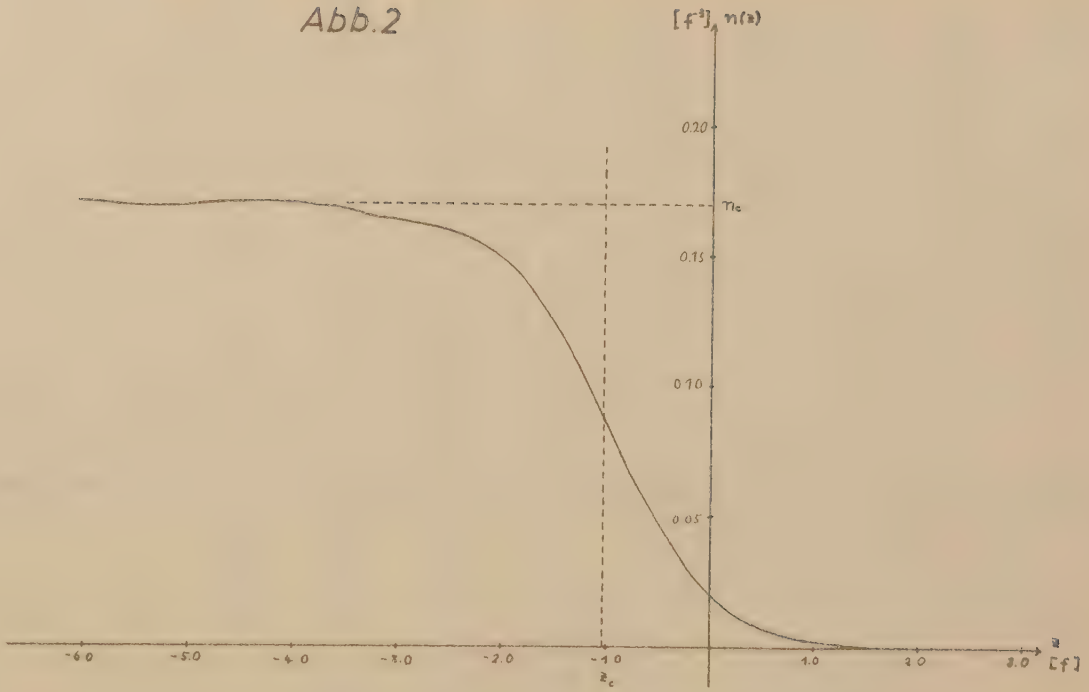


Abb. 1
α_0
[MeV]
10.0
5.0
-5.0
-10.0
-15.0
α_c
0.5
1.0
k_c
1.5
2.0
k_0
[f^{-1}]

Abb.2



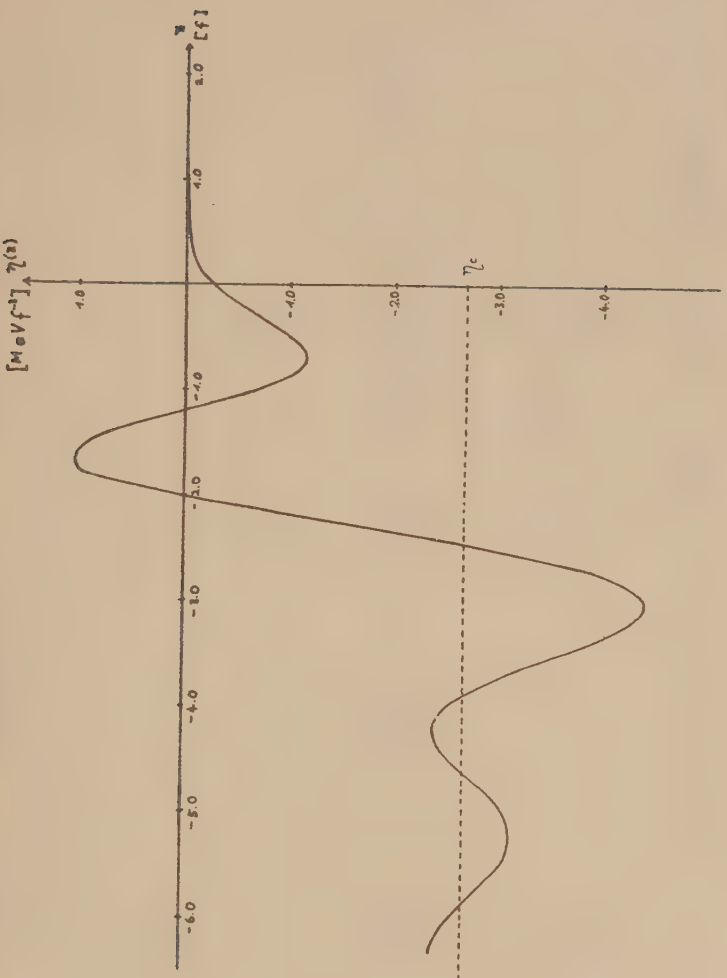


Abb. 3

Abb. 4

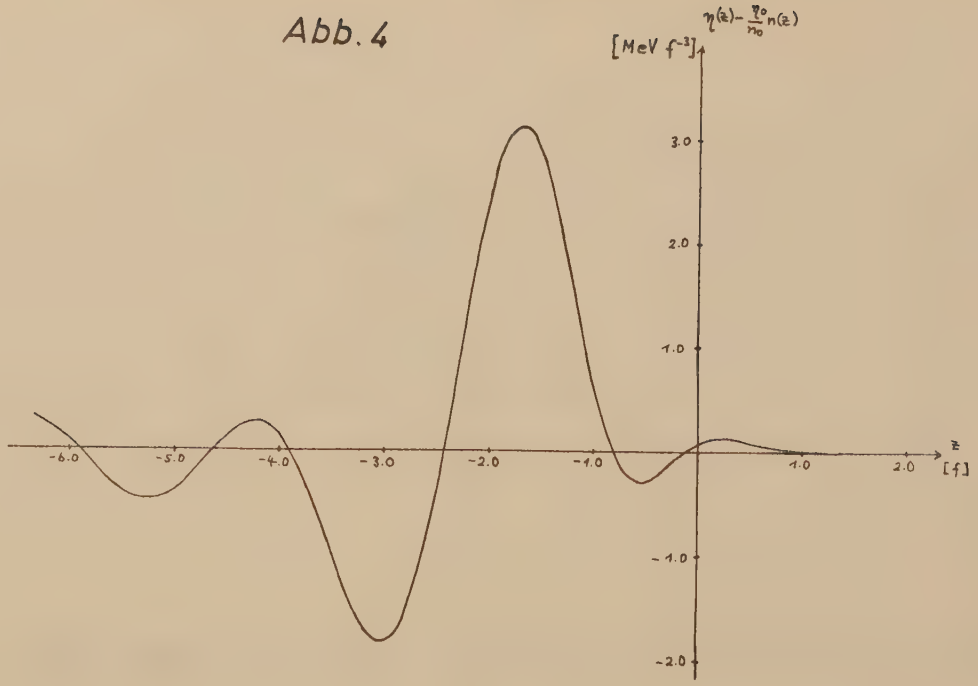


Abb.5

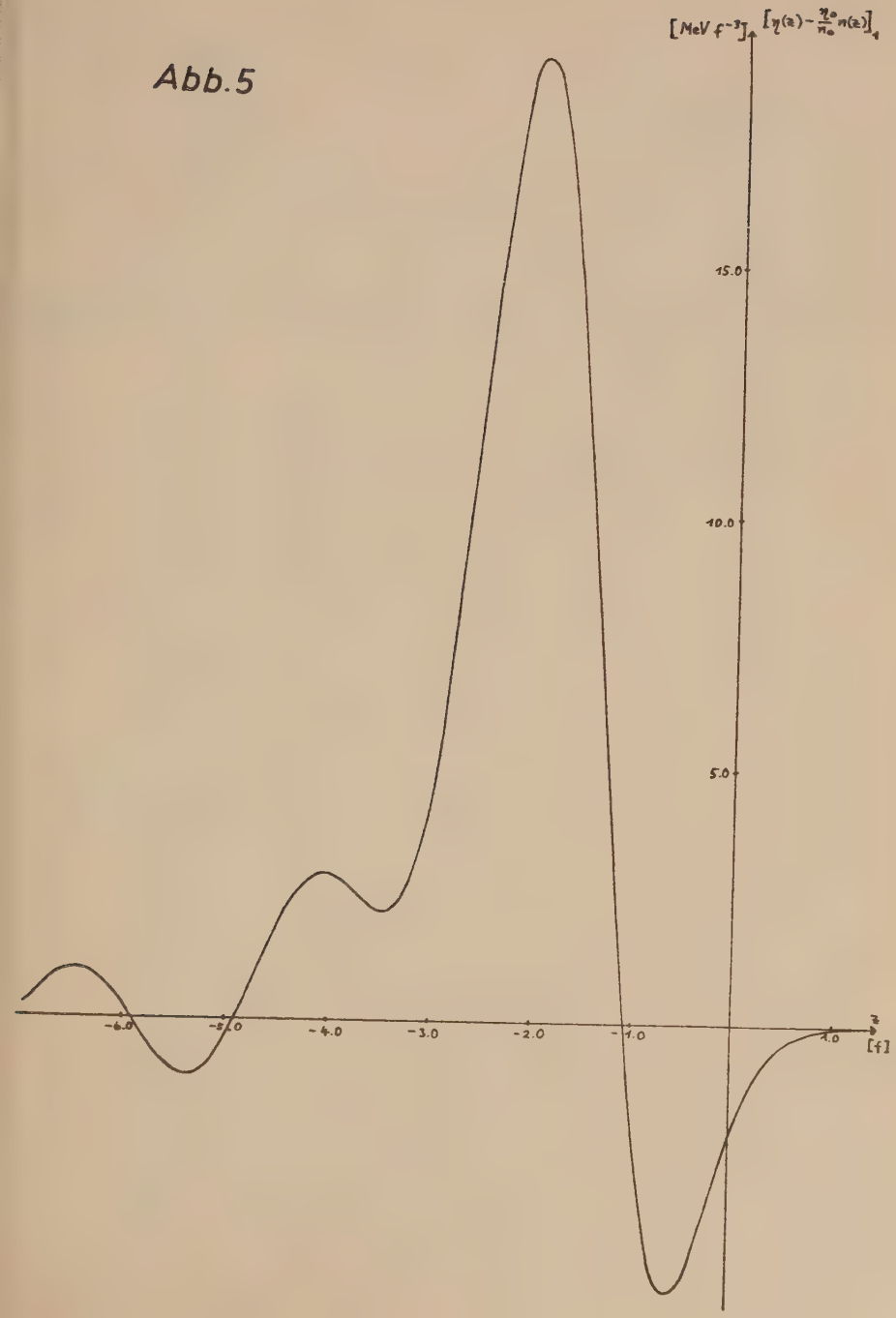


Abb.6

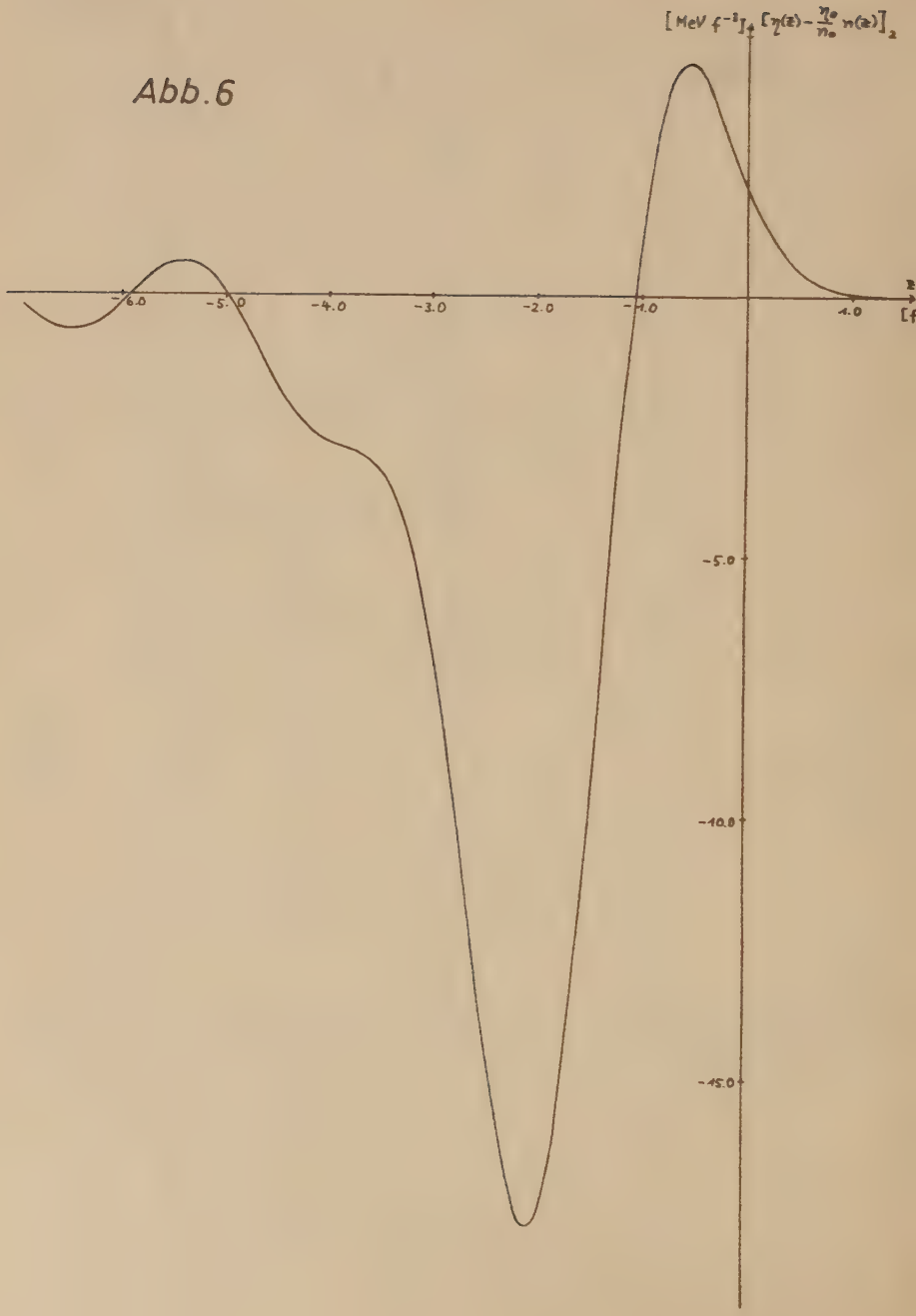
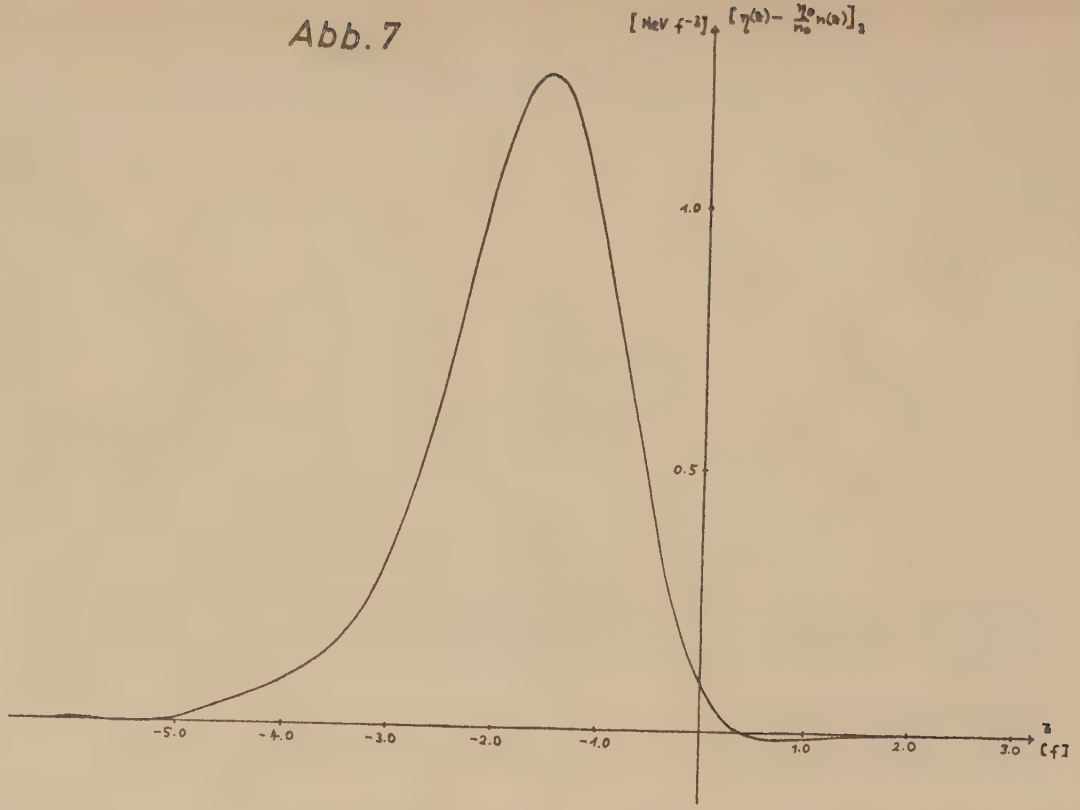


Abb. 7



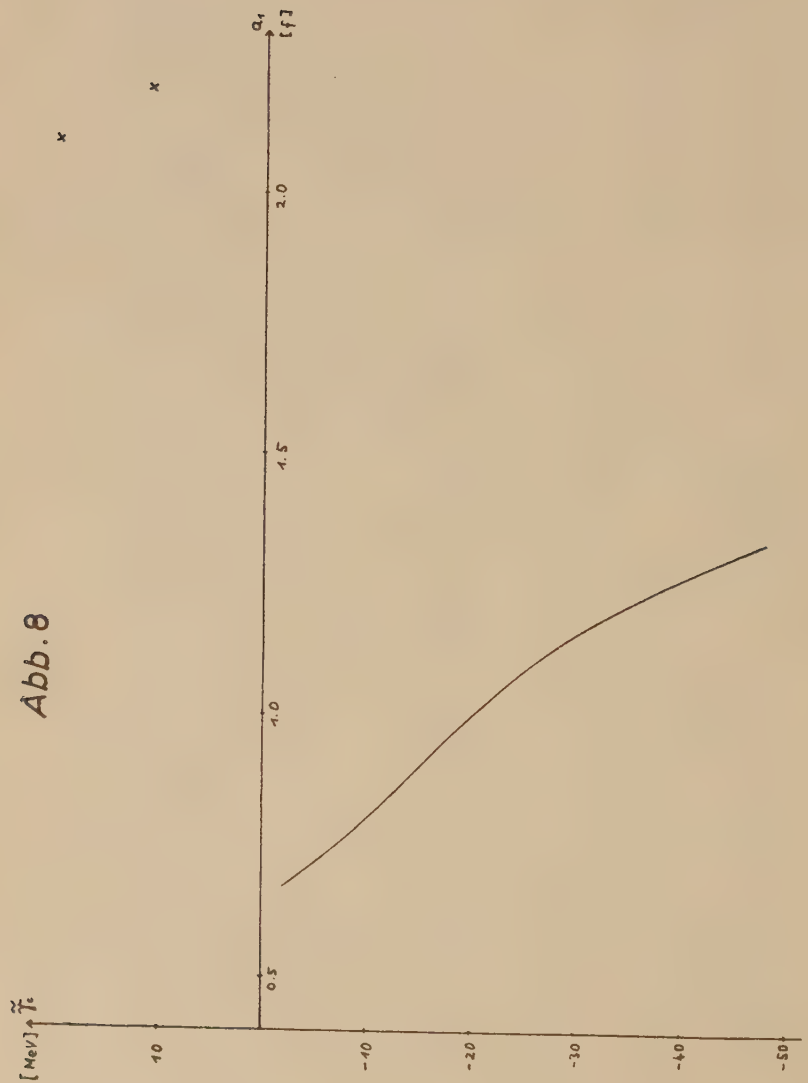


Abb. 8

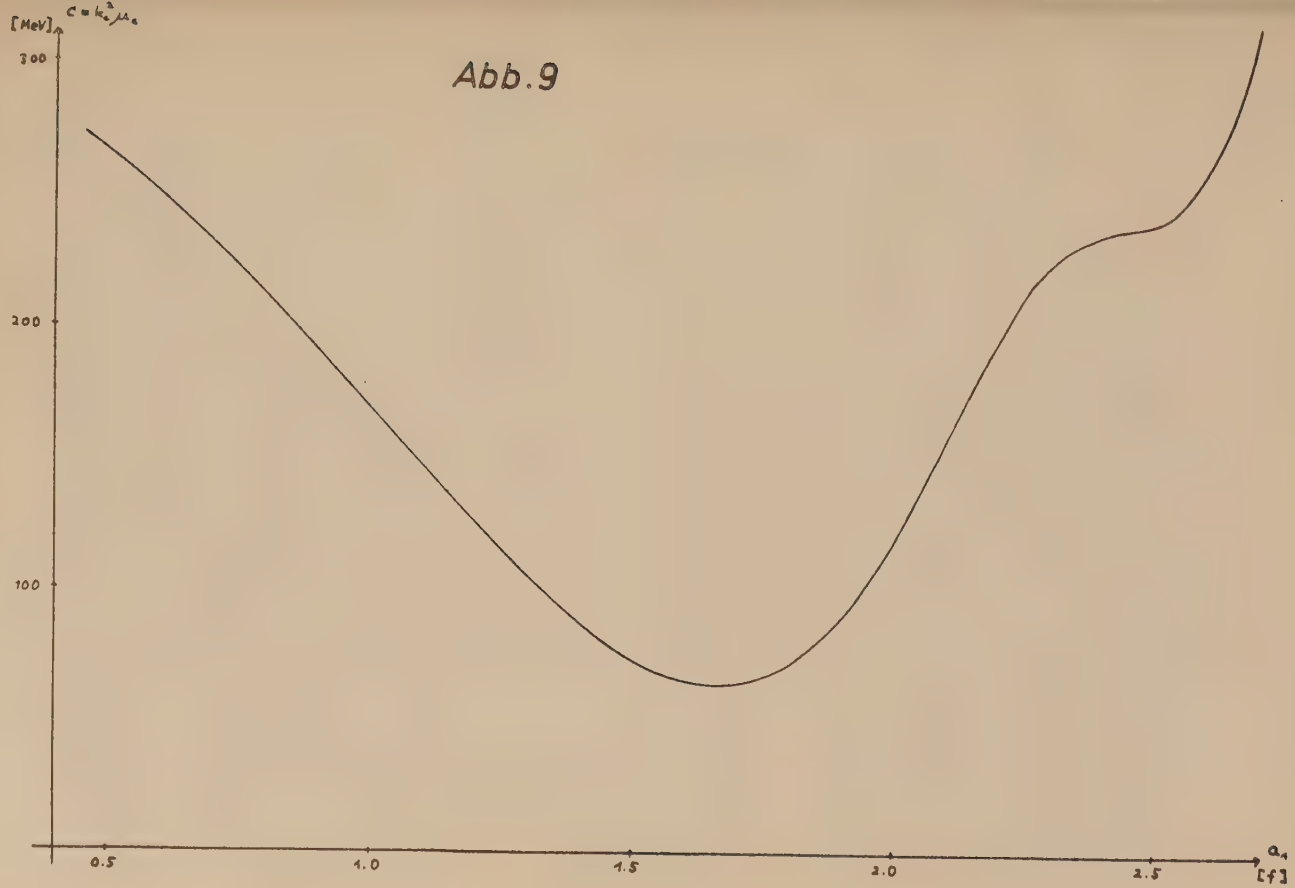


Abb.9
[MeV]
$C = k_0^2/\mu_0$
300
200
100
0.5
1.0
1.5
2.0
2.5
a_1
[f]

Literaturverzeichnis

1) C.F.v.Weizsäcker, Z.f.Phys. 96 (1935) 431
2) H.A.Bethe and R.F.Bacher, Rev.Mod.Phys. 8 (1936) 82
3) A.G.W.Cameron, Can.J.Phys. 35 (1957) 1021
4) A.E.S.Green and D.F.Edwards, Phys.Rev. 91 (1953) 46
5) V.M.Strutinski and A.S.Tyapin, Sov.Phys. JETP 18 (1964) 664
6) W.D.Myers and W.J.Swiatecki, Nucl.Phys. 81 (1966) 1
7) R.Hofstadter, Rev.Mod.Phys. 28 (1956) 214
8) W.J.Swiatecki, Proc.Phys.Soc. A64 (1951) 226
9) P.J.Hill and J.A.Wheeler, Phys.Rev. 89 (1953) 1125
10) R.A.Berg and L.Wilets, Phys.Rev. 101 (1956) 201
11) L.Wilets, Phys.Rev. 101 (1956) 1805,
Rev.Mod.Phys. 30 (1958) 542
12) M.A.Naqvi, Nucl.Phys. 10 (1959) 256
13) L.Rosenfeld, Sommerschule Bergen (1961) 126
14) B.H.J.McKellar and M.A.Naqvi, Nucl.Phys. 71 (1965) 161
15) H.S.Köhler, Nucl.Phys. A91 (1967) 593
16) F.Tabakin and K.Amos, Nucl.Phys. A100 (1967) 574
17) H.A.Bethe, Phys.Rev. 167 (1968) 879
18) J.Nemeth and H.A.Bethe, Nucl.Phys. A116 (1968) 241
19) W.D.Myers, UCRL Rep. 18214 (1968), veröffentlicht in
W.D.Myers and W.J.Swiatecki, Ann.of Phys.(N.Y.) 55 (1969) 395
20) I.J.Donnally, Nucl.Phys. A128 (1969) 129
21) H.S.Köhler, Nucl.Phys. 139 (1969) 353
22) P.J.Siemens, Phys.Rev. C1 (1970) 98
23) S.A.Moszkowski, Phys.Rev. C2 (1970) 402
24) Y.C.Lin, Nucl.Phys. A140 (1970) 359
25) W.Stocker, Nucl.Phys. A166 (1971) 205
26) S.A.Guruits, M.A.Migdal and A.M.Polykow, Sov.Phys.
JETP 19,1 (1964) 149
27) E.Hilf and G.Süßmann, Physics Letters 21 (1966) 654
28) S.Knaak, G.Süßmann, E.Hilf and A.Büttner, Physics Letters
23 (1966) 711
29) J.C.Reynolds, Phys.Rev. 130 (1963) 1891

30) P.J.Feibelman, Physics Letters 26B (1968) 601,
Ann.of Phys. 48 (1968) 369
31) W.Stocker, Nucl.Phys. A140 (1970) 305,
Nucl.Phys. A159 (1970) 222
32) G.Süßmann: Über die Oberflächenspannung deformierter Atomkerne, (1967) unveröffentlicht
33) A.S.Tyapin, Sov.J.of Nucl.Phys. 13 (1971) 18
34) H.v.Groote and E.Hilf, Nucl.Phys. A129 (1969) 513
35) H.Schultheis, R.Schultheis and G.Süßmann, Nucl.Phys. A144 (1970) 545,
H.Schultheis and R.Schultheis, Physics Letters 34B (1971) 245, 35B (1971) 296
36) T.L.Hill, J.Amer.Chem.Soc. 72 (1950) 3923
37) S.Kondo, J.Phys.Soc.Japan 10 (1955) 381
38) S.Ono, S.Kondo: Molecular Theory of Surface Tension in Liquids. Handbuch d. Physik X (Springer 1960)
39) J.W.Gibbs: Collected Works, Vol. 1 (New Haven, Yale University Press 1948)
40) M.A.Preston: Physics of the Nucleus (Addison-Wesley Publish. Comp., Reading,Mass. 1962) p.125
41) K.A.Brueckner and L.J.Gammel, Phys.Rev. 109 (1958) 1023
42) R.D.Puff, Ann.of Phys. 13 (1961) 317
43) D.J.Thouless: Quantenmechanik der Vielteilchensysteme, III. 1. (letzter Absatz), p.29, B.I. 52/52a (Mannheim 1964)
44) W.Blaschke: Vorlesungen über Integralgeometrie. Zweites Heft. Teubner (Leipzig und Berlin 1937) §29, p.70
45) N.M.Hugenholtz and L.Van Hove, Physica 24 (1958) 363
46) M.Abramowitz and I.A.Stegun: Handbook of Mathematical Functions. Dover Publications (New York 1965)
47) A.H.Stroud, Don Secrest: Gaussian Quadrature Formulas. Prentice-Hall (Englewood Cliffs, N.J., 1966)
48) G.Süßmann, UCRL Rep. 19960 (1970)
49) H.R.Collard, L.R.B.Elton, R.Hofstadter; Landolt-Börnstein, Gruppe I: Kernphysik u. Kerntechnik. Band 2: Kernradien §1.1 p. 3, Springer (1967)

50) P.A.Seeger and P.C.Perisho, Los Alamos Rep. LA 3751 (1967), zitiert in Ref.23)
51) G.Süßmann: Einführung in die Quantenmechanik, Konstantentabelle im Anhang. B.I. 9/9a (Mannheim 1963)
52) A.E.S.Green, Phys.Rev. 95 (1954) 1006
53) W.D.Myers and W.J.Swiatecki, UCRL Rep. 17070 (1966)
54) H.D.Keller, Nucl.Phys. A175 (1971) 141

Meinem verehrten Lehrer, Herrn Professor Dr. G. Süßmann, danke ich für die Anregung zu dieser Arbeit und sein dauerndes Interesse an ihrem Fortgang. Er hat mich in vielen Diskussionen zur Lösung der auftretenden Schwierigkeiten und Probleme geführt.

Den Leitern des Beschleunigerlaboratoriums der Universität und Technischen Universität München danke ich für die Möglichkeit, die eigentlich als Prozeßrechner gedachte Rechenanlage PDP-10 benutzen zu dürfen. Einige Anfangsrechnungen wurden an der IBM 360/91 des Instituts für Plasmaphysik in Garching mit Mitteln der Deutschen Forschungsgemeinschaft durchgeführt, auch hierfür habe ich zu danken.

Fräulein Markert danke ich für ihre Hilfe bei der Anfertigung des Schreibmaschinen-Manuskripts.

Lebenslauf.

Am 28. Juni 1942 wurde ich in Berlin geboren als Sohn des Syndikus Dr. Richard Knaak und seiner Ehefrau Klara, geborene Gottlöber. Ich besuchte in den Jahren 1948 bis 1950 die Volksschule in Amorbach im Odenwald, dann in Frankfurt am Main von 1950 bis 1952 die Glauburgschule und von 1952 bis 1961 die Musterschule (Realgymnasium). Dort erwarb ich Ostern 1961 das Reifezeugnis. Im Sommersemester 1961 begann ich das Studium der Physik an der Johann Wolfgang Goethe-Universität in Frankfurt am Main, bestand dort die Diplom-Vorprüfung im Juli 1963 und die Diplom-Hauptprüfung im Juli 1966. Ende 1967 erhielt ich von Professor Dr. G. Süßmann, bei dem ich schon in Frankfurt die Diplom-Arbeit ausgeführt hatte, eine Stelle als Verwalter der Dienstgeschäfte eines wissenschaftlichen Assistenten an der Universität München und damit die Möglichkeit, an seinem Lehrstuhl zu promovieren.